

## RESUMEN

En la actualidad existen diferentes procedimientos de estimación del alcance inflamable de atmósferas explosivas y por tanto su clasificación en zonas ATEX (normativa vigente de clasificación de Atmósferas Explosivas).

El presente proyecto realiza un estudio sobre la viabilidad de simular estas atmósferas explosivas generadas habitualmente en procesos industriales diversos, mediante herramientas computacionales o llamadas también CFD (Computational Fluid Dynamics). Se establecen para ello tres tipos de escenarios y a la vez característicos de dichas operaciones, en las cuales se generan o se pueden generar atmósferas inflamables. Estos escenarios son la carga y descarga de material inflamable en depósitos, la emanación de vapores inflamables procedentes de charcos o derrames y finalmente la fuga a presión accidental de un compuesto inflamable de una conducción. Los escenarios se simularán como casos básicos y como casos ampliados potenciando la renovación mediante campana extractora.

Para realizar este estudio es básico caracterizar en primer lugar ciertos parámetros claves de cada escenario o caso. En primer lugar se establece mediante cálculos referenciados y especificados el valor de la tasa de emisión. En segundo lugar se establece la renovación de aire fresco de la estancia o volumen de control. Una vez caracterizados estos dos parámetros básicos se definen otros como temperaturas, presiones, concentraciones etc.

Es necesario además y una vez caracterizado el caso con estos parámetros preparar la simulación. Esto implica realizar un mallado del escenario (volumen de control, elementos que intervienen puertas, ventanas, bocas, campanas etc.) que será la base sobre la cual trabajara el simulador con los valores de tasa de emisión y renovación previamente calculados. Llegado este punto configuramos el simulador y lanzamos la simulación propiamente. Posteriormente deberemos hacer un análisis de los resultados. El análisis recurre a los métodos actuales de cálculo de alcance inflamable para validar el resultado de la simulación.

El proyecto consta a su vez de tutoriales ilustrados de creación de mallas, arranque del simulador, postprocesing así como una breve aproximación al marco legal ATEX y disponibilidad de aplicaciones en el mercado de herramientas CFD, todo ello con la intención de introducir al lector a la simulación útil de dichas atmósferas en casos complejos donde quede justificado este recurso ante los métodos empíricos de que se dispone hoy en día.





# SUMARIO

<b>RESUMEN</b>	<b>1</b>
<b>SUMARIO</b>	<b>3</b>
<b>1. GLOSARIO</b>	<b>7</b>
<b>2. INTRODUCCIÓN</b>	<b>9</b>
2.1 Objetivos del proyecto.....	9
2.2 Alcance del proyecto.....	9
<b>3. METODOS DE ESTIMACION DE ALCANCES INFLAMABLE</b>	<b>10</b>
3.1 Introducción.....	10
3.2 Procedimiento para la clasificación de zonas vapor/gas.....	10
3.2.1 Caracterización del escape.....	10
3.2.2 Ventilación .....	11
3.3 Determinación de zonas con formulas analíticas según UNE-EN 60079-10.....	13
3.4 Representación gráfica de las zonas.....	15
<b>4. BASE CIENTÍFICA DEL METODO CFD</b>	<b>18</b>
4.1 Introducción.....	18
4.2 Historia del método CFD.....	18
4.3 Base matemática del método .....	18
4.4 Análisis mediante elementos finitos.....	20
4.5 Aplicaciones de CFD.....	21
4.6 Ventajas y desventajas del método CFD.....	21
<b>5. APLICACIONES INFORMÁTICAS DISPONIBLES</b>	<b>22</b>
5.1 Contexto .....	22
5.2 Listado completo de aplicaciones disponibles en el mercado.....	22
5.3 Comsol .....	25
5.3.1 Descripción .....	25
5.3.2 Visión general .....	25
5.3.3 Áreas de aplicación.....	26
5.4 Fluent/Gambit.....	27
<b>6. APLICACIÓN A CASOS PRACTICOS</b>	<b>28</b>
6.1 Introducción.....	28



6.2	Caso bidón de tolueno.....	30
6.2.1	Definición de la geometría .....	30
6.2.2	Definición de las condiciones de operación.....	30
6.2.3	Caracterización de la fuente de escape .....	30
6.2.4	Parámetros de simulación .....	31
6.2.5	Obtención de resultados.....	32
6.2.6	Conclusión .....	34
6.3	Caso GRG de Tolueno (Gran Recipiente a Granel) .....	34
6.3.1	Definición de la geometría .....	34
6.3.2	Definición de las condiciones de operación.....	34
6.3.3	Caracterización de la fuente de escape .....	34
6.3.4	Parámetros de la simulación .....	35
6.3.5	Obtención de resultados.....	35
6.3.6	Conclusión .....	38
6.4	Caso bidón de tolueno con campana.....	38
6.4.1	Definición de la geometría .....	38
6.4.2	Definición de las condiciones de operación.....	38
6.4.3	Caracterización de la fuente escape .....	38
6.4.4	Parámetros de simulación .....	39
6.4.5	Obtención de resultados.....	40
6.4.6	Conclusión .....	41
6.5	Caso GRG de tolueno con campana .....	41
6.5.1	Definición de la geometría .....	41
6.5.2	Definición de las condiciones de operación.....	42
6.5.3	Caracterización de la fuente de escape .....	42
6.5.4	Parámetros de simulación .....	43
6.5.5	Obtención de resultados.....	43
6.5.6	Conclusión .....	45
6.6	Escape de gas natural ( emisión 2 mm).....	45
6.6.1	Definición de la geometría .....	45
6.6.2	Definición de las condiciones de operación.....	46
6.6.3	Caracterización de la fuente de escape .....	46
6.6.4	Parámetros de simulación .....	49
6.6.5	Obtención de resultados.....	49
6.6.6	Conclusión .....	51
6.7	Escape de gas natural (emisión 5 mm) .....	52
6.7.1	Definición de la geometría .....	52
6.7.2	Definición de las condiciones de operación.....	52
6.7.3	Caracterización de la fuente de escape .....	52



6.7.4	Parámetros de simulación .....	55
6.7.5	Obtención de resultados .....	55
6.7.6	Conclusión .....	57
6.8	Charco tolueno .....	57
6.8.1	Definición de la geometría .....	57
6.8.2	Definición de las condiciones de operación .....	57
6.8.3	Caracterización de la fuente de escape .....	57
6.8.4	Parámetros de simulación .....	60
6.8.5	Obtención de resultados .....	60
6.8.6	Conclusión .....	61
6.9	Charco tolueno con campana .....	62
6.9.1	Definición de la geometría .....	62
6.9.2	Definición de las condiciones de operación .....	62
6.9.3	Caracterización de la fuente de escape .....	62
6.9.4	Parámetros de simulación .....	65
6.9.5	Obtención de resultados .....	65
6.9.6	Conclusión .....	68
<b>7.</b>	<b>IMPACTO AMBIENTAL DEL PROYECTO .....</b>	<b>69</b>
7.1	Papel .....	69
7.2	Electricidad .....	69
7.3	Otros consumos .....	70
<b>8.</b>	<b>PRESUPUESTO DEL PROYECTO .....</b>	<b>71</b>
8.1	Desplazamientos .....	71
8.2	Creación malla .....	71
8.3	Previo simulación .....	72
8.4	Simulación .....	72
8.5	Análisis de resultados con el cliente .....	72
8.6	Amortización de las licencias .....	72
8.6	Ejemplo coste caso charco tolueno .....	73
<b>CONCLUSIONES</b> .....		<b>74</b>
<b>BIBLIOGRAFÍA</b> .....		<b>75</b>
<b>ANEXO A: MARCO LEGAL</b> .....		<b>76</b>
A.1	Introducción .....	76
A.2	Algunas Definiciones .....	76
A.3	Marco Legislativo .....	78



A.3.1	¿Que es ATEX? .....	78
A.3.2	Protección contra explosiones .....	78
A.3.3	Atmósferas Explosivas .....	78
A.3.4	Actividades Afectadas .....	79
A.4	ATEX 100 (94/9/CE) ( RD 400/1996) .....	83
A.4.1	Objetivo de la directiva.....	83
A.4.2	Campo de aplicación .....	83
A.4.3	Fecha de aplicación y derogaciones .....	84
A.4.4	Exclusiones.....	84
A.4.5	Aplicación junto a otras directivas.....	85
A.4.6	Grupos y categorías de aparatos .....	85
A.5	ATEX 137 (1999/92/CE) (RD681/2003) .....	86
A.5.1	Objetivo de la directiva.....	86
A.5.2	Campo de aplicación .....	86
A.5.3	Fecha de aplicación y derogaciones .....	86
A.5.4	Exclusiones.....	86
A.5.5	Aplicación junto a otras directivas.....	87
A.5.6	Obligaciones del empresario .....	87
A.5.7	Clasificación de emplazamientos o áreas .....	88

## **ANEXO B: FUNCIONAMIENTO DE GAMBIT. CREACIÓN DE MALLAS90**

## **ANEXO C: FUNCIONAMIENTO DE FLUENT. \_\_\_\_\_ 102**

## **ANEXO D. CÁLCULO DE TASAS DE ESCAPE (CETIB) \_\_\_\_\_ 109**

D.1	Comparativa de los cálculos de tasas de emisión .....	109
D.1.1	Operaciones de carga y descarga de depósitos .....	109
D.1.2	Emanación de vapores de un derrame o charco.....	109
D.1.3	Emisión puntual de gas a presión.....	110

## **ANEXO E: FICHEROS DE CÁLCULO \_\_\_\_\_ 114**



# 1. Glosario

## ACRONIMOS:

- CFD: Computational Fluid Dynamics
- GRG: Gran recipiente a granel

## SIMBOLOS:

$M_v$  = Masa atómica del compuesto

$P_{VA}$  = Presión de vapor del compuesto

$Q$  = Capacidad del depósito

$K_N$  = constante atmosfera saturada

$K_p$  = constante como disolvente orgánico

$\lambda$  = Renovaciones del aire de la estancia ( $s^{-1}$ )

$Q$  = flujo másico ( $kg \cdot s^{-1}$ )

$C$  = coeficiente de descarga, adimensional, =0.72

$A$  = area agujero descarga ( $m^2$ )

$k = c_p / c_v$  del gas

$c_p$  = calor específico del gas a P cte.

$c_v$  = calor específico del gas a V cte.

$\rho$  = densidad del gas real a P y T ( $kg / m^3$ )

$P$  = presión absoluta aguas arriba (Pa)

$P_A$  = presión absoluta ambiente (Pa)

$M$  = masa molecular del gas ( $kg \cdot mol^{-1}$ )

$R$  = constante de la ley universal de los gases =  $8314 J \cdot mol^{-1} \cdot K^{-1}$

$T$  = Temperatura del gas aguas arriba (K)

$D_m$  = difusividad molecular en aire, en ( $m^2 s^{-1}$ )

$D_{H_2O}$  = difusividad molecular del agua ( $2.4 \cdot 10^{-5} m^2 s^{-1}$ )

$M_{w_{H_2O}}$  = peso molecular del agua ( $18 kg \cdot kmol^{-1}$ )

$M_{w_m}$  = peso molecular del compuesto ( $kg \cdot kmol^{-1}$ )

$S_c$  = Número laminar de Schmidt

$\nu$  = viscosidad cinemática del aire ( $m^2 s^{-1}$ )

$D_m$  = Difusividad molecular del compuesto en aire ( $m^2 s^{-1}$ )



$K_m$  = coeficiente de transferencia de masa del compuesto ( $m \cdot s^{-1}$ )

$U$  = velocidad del viento ( $m \cdot s^{-1}$ )

$Z$  = Longitud característica del charco en la dirección del viento

$S_c$  = Número laminar de Schmidt

$E$  = tasa de evaporación ( $kg \cdot s^{-1}$ )

$A$  = área del charco en evaporación ( $m^2$ )

$K_M$  = coeficiente de transferencia de masa ( $m \cdot s^{-1}$ )

$M_w$  = peso molecular del compuesto ( $kg \cdot kmol^{-1}$ )

$P_v$  = presión de vapor ( $Pa$ )

$R$  = constante de los gases ( $8314 J \cdot kmol^{-1} \cdot K^{-1}$ )

$T$  = temperatura ambiente ( $K$ )





## 2. INTRODUCCIÓN

Las herramientas de cálculo computacional de que disponemos hoy en día permiten la simulación reológica de fluidos. Este proyecto pretende dar un paso en esta línea y simular con estas herramientas un volumen de control relativamente sencillo en el cual desarrollaremos diferentes escenarios de simulación.

### 2.1 Objetivos del proyecto

Como primer objetivo nos fijamos la realización de simulaciones verídicas de atmósferas explosivas acordes con la realidad. En segundo lugar verificaremos con métodos de cálculo actuales dicha simulación, fijándonos en el alcance de la clasificación de dichas atmósferas según la vigente normativa ATEX. Pretendemos hacer de esta una herramienta útil en el campo de la clasificación de zonas ATEX, por tanto un tercer y último objetivo será la validación del procedimiento atendiendo a este objetivo.

### 2.2 Alcance del proyecto

Con este proyecto no se pretende hacer un estudio exhaustivo de un caso complejo sino contrariamente, establecerse como una guía práctica con un estudio variado de casos reales y cotidianos de los procesos industriales. Estudiaremos ocho casos, desde su enfoque sencillo como ampliado los cuales trataran de resolver los objetivos propuestos para los escenarios de carga y descarga de un depósito, emanación de vapores inflamables en derrames y finalmente fugas a presión de conducciones.

En todos estos casos las geometrías serán sencillas permitiendo un sencillo estudio de resultados, así como facilitando la comparativa entre todos ellos. El proyecto prevé que el lector aplique los conocimientos adquiridos en este periplo mediante guías y tutoriales, facilitando a su vez el estudio de situaciones y escenarios mas complejos, pero de determinante importancia para la industria en lo concerniente a clasificación de atmósferas explosivas según la norma ATEX.



### 3. METODOS DE ESTIMACION DE ALCANCES INFLAMABLE

#### 3.1 Introducción

En la actualidad la industria relacionada con las atmósferas inflamables proceden a estimar el alcance de las mismas de dos formas bien diferenciadas, la primera como consecuencia de la naturaleza de la materia siendo esta gas o vapor y la segunda si la materia esta en forma polvulolienta. Veremos ambas formas de estimación. En determinados ambientes puede ser crucial para la prevención y extinción de fuegos [1].

#### 3.2 Procedimiento para la clasificación de zonas vapor/gas

##### 3.2.1 Caracterización del escape

En primer lugar debemos caracterizar el escape como tal, esto es definir el estado dentro de los tres posibles que mas relevancia tienen a efectos: gas o vapor, liquido que apenas se evapora durante el escape, liquido o gas licuado que se evapora durante el escape. Ahora debemos caracterizar la velocidad de emisión como alta o baja. Una vez tenemos parametrizados estos dos factores procedemos al dimensionado de los orificios debidos a fallos. Para ello existe un cálculo normalizado en los siguientes casos:

- Bridas
- Válvulas
- Válvulas de seguridad, discos de seguridad y juntas hidráulicas
- Bombas centrifugas
- Compresores alternativos
- Compresores centrífugos
- Conexiones de pequeñas dimensiones
- Puntos de drenaje y toma de muestras

Una vez caracterizado y evaluado el grado de escape debemos cuantificar el mismo mediante el cálculo de la tasa de emisión. Para ello hay que atender a factores como la



geometría de la fuente de escape, la concentración pues esta aumenta la tasa de escape, la volatilidad del líquido inflamable, la temperatura del líquido etc.

El cálculo de la tasa de emisión se realiza mediante un compendio de formulas bien armonizadas que permiten obtener la masa fugada a través del orificio así como la extensión de la fuga. Podemos calcular dicha masa fugada como caudal másico o bien volumétrico. La temperatura se deberá tener en cuenta en el caso en que la sustancia líquida emane por debajo de su punto de ebullición y si el chorro de esta forma un charco o bien un ángulo por encima o por debajo de la horizontal.

Se calcularán tasas de emisión en el caso de que el escape provenga de un equipo (escapes estructurales). En este caso contamos con una serie de tablas que nos ayudan a caracterizar el caudal másico fugado dependiendo de si el equipo a considerar es una conexión, un venteo o drenaje, aparatos alimentados por gas etc. Dentro de esta clasificación encontraremos una subclasificación atendiendo a una descripción orientada a dicho equipo. Estas tablas solo hacen referencia a las tasas de emisión para metano y GLP (gas licuado a presión) lo que en la realidad supone un inconveniente al tratar con sustancias ajenas a estas tablas.

También debemos tener en cuenta si las condiciones de la fuga están o no por debajo del punto de destello, esto es si la cantidad fugada supondrá o no un riesgo clasificable e efectos atendiendo a si la temperatura ambiente será menor a la de destello de la sustancia inflamable manipulada lo cual asegura a su vez que no existirá atmósfera explosiva.

Para que exista atmósfera explosiva o inflamable clasificable debemos obtener una tasa de escape situada entre dos límites característicos, el inferior de inflamabilidad y el superior de inflamabilidad. En otras palabras, la concentración en la región del escape puede situarse dentro de un rango de concentraciones en el cual podemos asegurar que estamos en situación de riesgo. Si esta concentración esta por debajo del límite inferior de inflamabilidad (LII) no se considerara riesgosa, y por encima del límite superior de inflamabilidad tampoco (LSI), pero atención, este último caso no lo tendremos en cuenta y lo tomaremos como riesgoso pues la tendencia de los vapores o gases es siempre de difundir en el medio con lo que una alta concentración podría dispersarse hasta alcanzar el LSI y entrar en situación de riesgo explosivo, así pues y para resumir solo descartamos aquellas situaciones donde la concentración del escape este por debajo del LII, el resto serán de riesgo inflamable a efectos.

### 3.2.2 Ventilación

El gas o vapor que se ha escapado a la atmósfera se puede diluir o dispersar en el aire hasta que su concentración sea más baja que el límite inferior de explosión. La ventilación,



es decir, el movimiento de aire para reemplazar la atmósfera en un volumen (hipotético) alrededor de la fuente de escape por aire fresco, favorece la dispersión. Caudales apropiados de ventilación pueden también impedir la persistencia de una atmósfera de gas explosiva y por tanto influir en el tipo de zona.

a) Ventilación natural. Causada por el movimiento del aire debido a viento o gradientes de temperatura. Al aire libre a menudo será suficiente para asegurar la dispersión de la atmósfera explosiva que aparezca en el emplazamiento. En algunos interiores con aberturas también puede ser eficaz.

b) Ventilación artificial. El movimiento del aire requerido para la ventilación esta proporcionado por medios artificiales, por ejemplo ventiladores y extractores. La ventilación artificial de un emplazamiento puede ser general o local y para ambas, pueden ser apropiados diferentes grados de movimiento del aire. Con la ventilación artificial se puede conseguir:

- Una reducción de la extensión de zonas
- Una reducción del tiempo de permanencia de la atmósfera explosiva
- La prevención de la formación de una atmósfera explosiva

En la calidad de la ventilación influirán los siguientes aspectos:

Los gases y vapores inflamables normalmente tiene densidades diferentes a la del aire, por tanto su tendencia será la de acumularse en el suelo o techo del emplazamiento cerrado

- Las variaciones de la densidad de los gases con la temperatura
- Los impedimentos y obstáculos pueden reducir e incluso suprimir el movimiento del aire.

A efectos de poder clasificar una zona atendiendo a su ventilación distinguiremos las siguientes categorías: Grado de ventilación (alta, media o baja); Ineficiencia de la ventilación; Disponibilidad de la ventilación (alta, normal, pobre, natural o artificial).



VENTILACIÓN	GRADO	VA			VM			VB
	DISPONIBILIDAD	Alta	Normal	Pobre	Alta	Normal	Pobre	
GRADO DE ESCAPE	CONTINUO	(Zona 0 ED)	(Zona 0 ED)	(Zona 0 ED)				
		Sin riesgo	Zona 2	Zona 1	Zona 0	Zona 0 +	Zona 0 +	Zona 0
	PRIMARIO	((Zona 1 ED)	(Zona 1 ED)	(Zona 1 ED)		Zona 2	Zona 1	
		Sin riesgo	Zona 2	Zona 2	Zona 1	Zona 2	Zona 2	Zona 1
	SECUNDARIO	(Zona 2 ED)	(Zona 2 ED)					*o Zona 0
		Sin riesgo	Sin riesgo	Zona 2	Zona 2	Zona 2	Zona 2	*o Zona 0

Tabla 3.2.2-Ventilación y grado de escape

### 3.3 Determinación de zonas con formulas analíticas según UNE-EN 60079-10

Tal y como recopila dicha norma [2], a continuación calcularemos para nuestros escenarios el alcance de atmósfera explosiva a fin y efecto de tener un valor orientativo. Para las siguientes tasas de escape, que se calcularán paso a paso en el estudio de los casos, estableceremos el alcance explosivo. Pedimos al lector en este punto que tome como válidas las tasas de escape propuestas, y que si desea ver sus pertinentes cálculos se dirija a los referenciados casos de estudio.

	TASA DE EMISIÓN	VELOCIDAD AIRE	REFERENCIA ESTUDIO
Emisión desde un charco	$E=4.379 \cdot 10^{-3} \text{ kg/s}$	$v=2 \text{ m/s}$	Apartado 6.8.3
Emisión durante la operación de llenado de un deposito tipo bidón 200 litros	$E=3.315 \cdot 10^{-4} \text{ kg/s}$	$v=2 \text{ m/s}$	Apartado 6.2.3
Emisión durante la operación de llenado de un deposito tipo GRG 1000 litros	$E=3.315 \cdot 10^{-4} \text{ kg/s}$	$v=2 \text{ m/s}$	Apartado 6.3.3
Escape de gas foco puntual diámetro 2 mm	$E=9.762 \cdot 10^{-4} \text{ kg/s}$	$v=0.5 \text{ m/s}$	Apartado 6.6.3
Escape de gas foco puntual diámetro 5 mm	$E=6.109 \cdot 10^{-3} \text{ kg/s}$	$v=0.5 \text{ m/s}$	Apartado 6.7.3

Tabla 3.2.2-2 Referencias de las tasas de escape



Según la norma UNE- EN 60079-10 [2] debemos calcular el caudal mínimo teórico de ventilación necesario como:

$$Q_{v\min} = \frac{G_{E\max}}{k \cdot LII} \cdot f_t \quad (\text{Ec. 3.3-1})$$

$Q_{v\min}$  = caudal mínimo en volumen de aire fresco

$G_{E\max}$  = Tasa máxima de escape de la fuente (kg/s)

$k$  = coeficiente de seguridad.  $k=0.25$  primario o  $k=0.5$  secundario

$f_T$  = factor de corrección que tiene en cuenta el efecto de la temperatura

para todos los casos a  $T=293$  K el factor sera igual a 1

$LII$  = límite inferior de inflamabilidad ( $\text{kg}/\text{m}^3$ )

$LII = 0.01\%$  tolueno y  $LII = 0.05\%$  metano

$$V_z = \frac{Q_{v\min}}{Q_0} \cdot V_0 = \frac{Q_{v\min}}{\lambda} \quad (\text{Ec.3.3-2})$$

$Q_0$  = Cabal de renovación del aire ( $\text{m}^3 / \text{s}$ )

$V_0$  = Volumen de la estancia ( $\text{m}^3$ )

$$v = 2 \text{ m/s} \rightarrow (2 \cdot 0.8) \text{ m}^2 \cdot 2 \text{ m/s} = 3.2 \text{ m}^3 / \text{s} \rightarrow \lambda = \frac{3.2 \text{ m}^3 / \text{s}}{150 \text{ m}^3} = 0.0213 \text{ s}^{-1}$$

$$v = 0.5 \text{ m/s} \rightarrow (2 \cdot 0.8) \text{ m}^2 \cdot 0.5 \text{ m/s} = 0.8 \text{ m}^3 / \text{s} \rightarrow \lambda = \frac{0.8 \text{ m}^3 / \text{s}}{150 \text{ m}^3} = 5.333 \cdot 10^{-3} \text{ s}^{-1}$$

$$LII\left(\frac{\text{kg}}{\text{m}^3}\right)_{\text{Tolueno}} = 0.01 \cdot 92.1 \frac{\text{g}}{\text{mol}} \cdot \frac{1}{22.4} = 0.04 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$$

$$LII\left(\frac{\text{kg}}{\text{m}^3}\right)_{\text{Metano}} = 0.05 \cdot 16 \frac{\text{g}}{\text{mol}} \cdot \frac{1}{22.4} = 0.035714 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$$



	TASA DE EMISIÓN	Vz	SIMULACIÓN (VER NOTA1)
Emisión desde un charco	$E=4.379 \cdot 10^{-3} \text{ kg/s}$	$10.305 \text{ m}^3$	$20 \text{ m}^3$ aprox
Emisión durante la operación de llenado de un deposito tipo bidón 200 litros	$E=3.315 \cdot 10^{-4} \text{ kg/s}$	$0.778 \text{ m}^3$	$0.2 \text{ m}^3$ aprox
Emisión durante la operación de llenado de un deposito tipo GRG 1000 litros	$E=3.315 \cdot 10^{-4} \text{ kg/s}$	$0.778 \text{ m}^3$	$0.5 \text{ m}^3$ aprox
Escape de gas foco puntual diámetro 2 mm	$E=9.762 \cdot 10^{-4} \text{ kg/s}$	$10.25 \text{ m}^3$	$0.2 \text{ m}^3$ aprox
Escape de gas foco puntual diámetro 5 mm	$E=6.109 \cdot 10^{-3} \text{ kg/s}$	$64.19 \text{ m}^3$	$0.5 \text{ m}^3$ aprox

Tabla 3.2.2-3 Comparativa entre UNE-EN 60079-10 y resultados simulación

Los volúmenes ofrecidos por la simulación son aproximados. En el caso del derrame es un volumen contenido en una pirámide oblicua de aproximadamente 20 metros cúbicos. En los depósitos se calcula como la semiesfera de 0.2 y 0.5 metros cúbicos para el bidón y el GRG respectivamente y en los casos de las emisiones a presión se calcula como el elipsoide envolvente. En los casos de emisión por vaporización (charco y bidón/GRG) los resultados son comparables desde un punto de vista práctico. Sin embargo para emisión por escape a presión (gas) los resultados son totalmente diferentes comparando los volúmenes ofrecidos por la simulación y los calculados por la norma UNE. Esto es debido a que la norma sólo tiene en cuenta un mecanismo empírico de dilución, mientras que la simulación considera al completo el mecanismo físico del escape y su posterior dilución turbulenta (nota1)

### 3.4 Representación gráfica de las zonas

Con objeto de comparar visualmente los resultados analíticos obtenidos con las simulaciones fluent, a continuación se presenta cada caso sobre la base geométrica en las que se verán reflejados los cálculos fluent. (los volúmenes han sido representados cualitativamente)

*NOTA 1: Los resultados de la simulación han sido comparados con modelos de chorro turbulento (jet) obteniéndose valores equivalentes de alcance inflamable.*



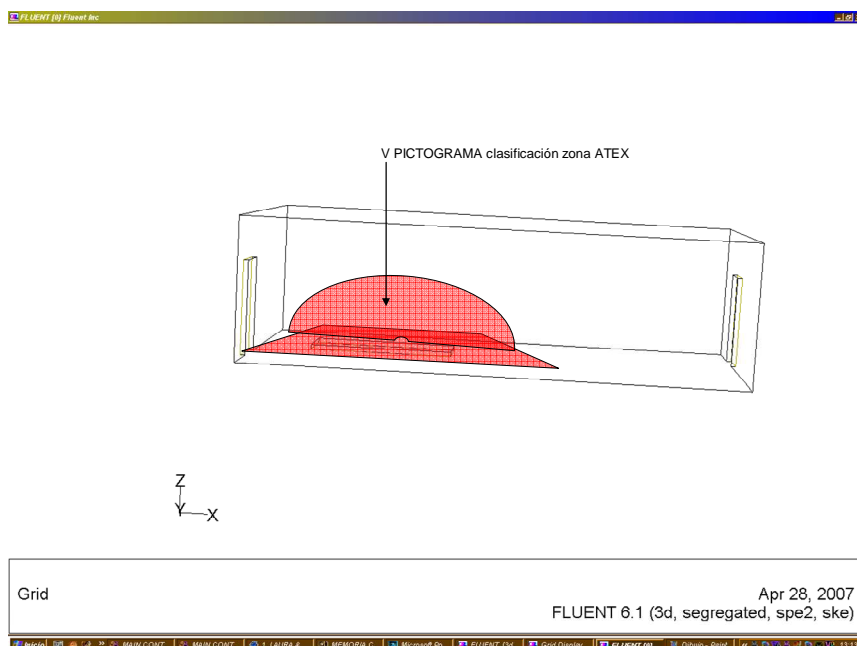


Fig. 3.4-1. Zona explosiva por pictogramas para el derrame

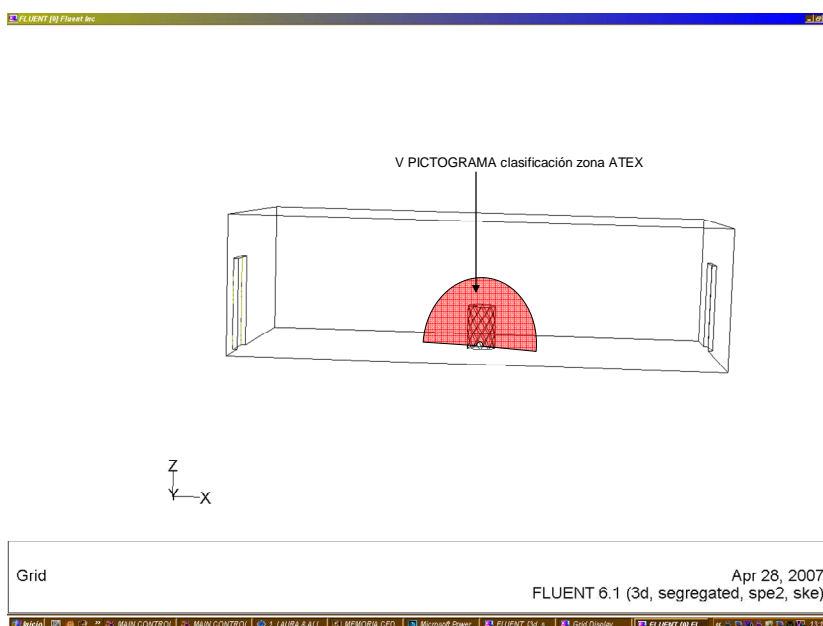


Fig. 3.4-2. Zona explosiva por pictogramas para el depósito de 200 litros





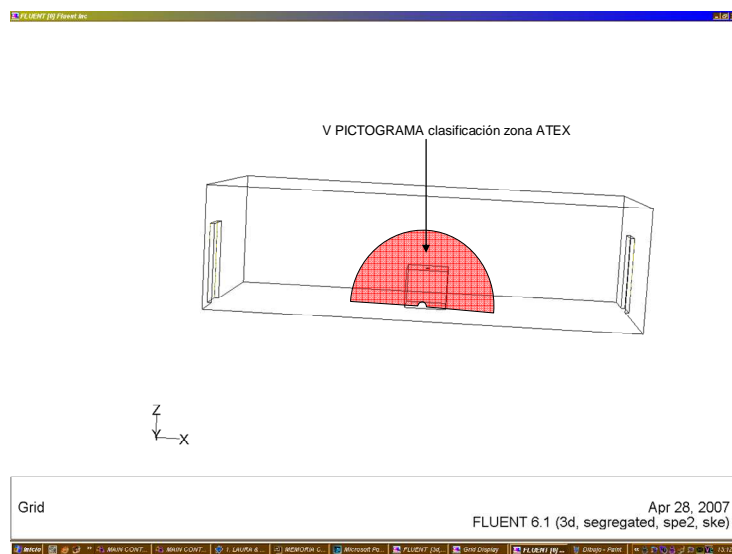


Fig. 3.4-3. Zona explosiva por pictogramas para el GRG de 1000 litros

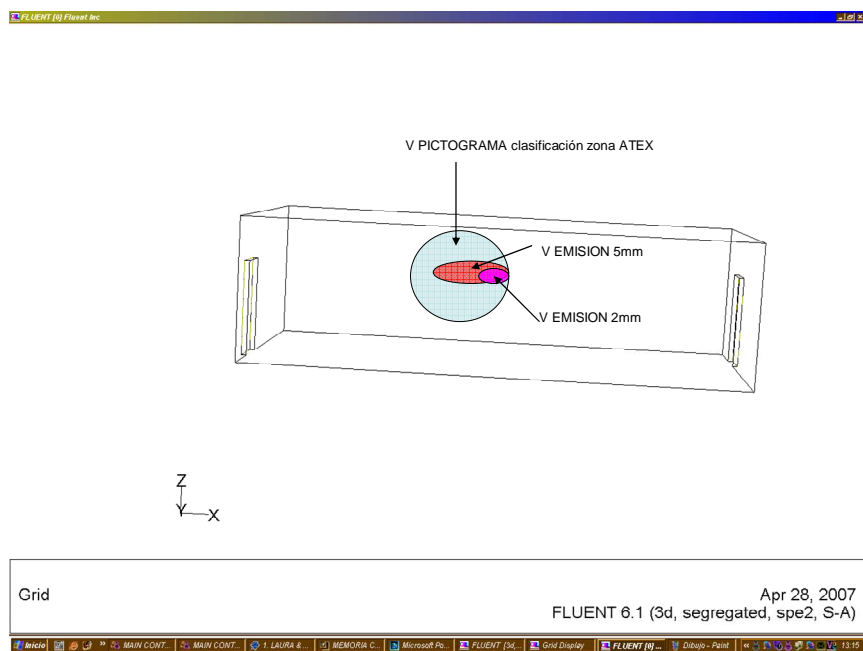


Fig. 3.4-4. Zona explosiva por pictogramas para los escapes a presión



## 4. BASE CIENTÍFICA DEL METODO CFD

### 4.1 Introducción

Debido a la complejidad creciente de los análisis que se realizan en todas las ramas de la Ingeniería Mecánica, el cálculo asistido por ordenador ha ido adquiriendo siempre mayor protagonismo. Se ha producido una evolución en la representación de los sistemas físicos, pasando de esquematizar partes del sistema en modo aproximado a reproducir todo el conjunto en modo detallado. Este proceso ha sido posible en gran parte debido a la constante mejora de las prestaciones de los equipos informáticos, y a la mejora de los programas de cálculo.

En el diseño de nuevos componentes, el uso de estas herramientas permite en la mayoría de los casos obtener resultados más precisos y sobre todo una reducción de costes al permitir analizar virtualmente el comportamiento de nuevas soluciones.

En el proceso de análisis y diseño se utilizan herramientas de cálculo como el análisis mediante elementos finitos (FEA por sus siglas en inglés) o la dinámica de fluidos computacional (CFD).

### 4.2 Historia del método CFD

CFD comenzó en los años 60 en la industria aeroespacial, y desde entonces ha madurado convirtiéndose a partir de los 80 en una herramienta vital para muchas industrias para las que la predicción del flujo de fluidos es importante. En los 90 se ha expandido de forma significativa a distintas aplicaciones y procesos industriales en los que interviene transferencia de calor, reacciones químicas (como combustión), flujos bifásicos, cambios de fase, transferencia de masa y esfuerzos al interactuar con sólidos, entre otros.

### 4.3 Base matemática del método

Dado que la simulación en CFD es básicamente un intento por predecir el comportamiento reológico de una o varias sustancias, la base matemática del simulador cuenta, entre otros, con los siguientes cálculos matemáticos (todas las expresiones están dadas en coordenadas rectangulares):



Balance de energía (Ecuación general y densidad de flujo de energía) [3]:

$$\begin{aligned}\left(\frac{q}{S}\right)_x &= -k \left(\frac{\partial T}{\partial x}\right) \\ \left(\frac{q}{S}\right)_y &= -k \left(\frac{\partial T}{\partial y}\right) \\ \left(\frac{q}{S}\right)_z &= -k \left(\frac{\partial T}{\partial z}\right)\end{aligned}\quad (\text{Ec. 4.3-1})$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \cdot c_p \cdot T) + (\vec{U} \cdot \nabla)(\rho \cdot c_p \cdot T) = \dot{T}_G + [\nabla \cdot \alpha \cdot \nabla(\rho \cdot c_p \cdot T)] - (\rho \cdot c_p \cdot T) \cdot (\nabla \cdot \vec{U}) \quad (\text{Ec. 4.3-2})$$

Cantidad de movimiento (Ecuación general y del tensor esfuerzo) [3] :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \cdot \vec{U}) + (\vec{U} \cdot \nabla)(\rho \cdot \vec{U}) = -\nabla P - \nabla \vec{\tau} - (\rho \cdot \vec{U}) \cdot (\nabla \vec{U}) + \rho \cdot \vec{g} \quad (\text{Ec. 4.3-3})$$

$$\vec{\tau} = -\mu \cdot [\nabla \cdot \vec{U} + (\nabla \cdot \vec{U})^T] \quad (\text{Ec.4.3-4})$$

Materia (Ecuación general y de continuidad del compuesto) [3]:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + (\nabla \cdot \rho \cdot \vec{U}) = 0 \quad (\text{Ec.4.3-5})$$

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} + (\vec{U} \cdot \nabla) C_A = \dot{G}_{A,G} + (\nabla \cdot D_{AB} \cdot \nabla C_A) - C_A \cdot (\nabla \cdot \vec{U}) \quad (\text{Ec.4.3-6})$$

Navier-Stokes [4]:

$$\rho \frac{Dv}{Dt} = -\nabla p + \mu \nabla^2 v + \rho g \quad (\text{Ec. 4.3-7})$$



## 4.4 Análisis mediante elementos finitos

El método de los elementos finitos (MEF en castellano o FEM en inglés) es un método numérico muy general para la resolución de ecuaciones diferenciales muy utilizado en diversos problemas de ingeniería y física.

El método se basa en dividir el cuerpo, estructura o dominio (medio continuo) sobre el que están definidas ciertas ecuaciones integrales que caracterizan el comportamiento físico del problema en una serie de subdominios no intersectantes entre sí denominados elementos finitos. El conjunto de elementos finitos forma una partición del dominio también denominada discretización. Dentro de cada elemento se distinguen una serie de puntos representativos llamados nodos. Dos nodos son adyacentes si pertenecen al mismo elemento finito, además un nodo sobre la frontera de un elemento finito puede pertenecer a varios elementos, el conjunto de nodos considerando sus relaciones de adyacencia se llama malla. Los cálculos se realizan sobre una malla o discretización creada a partir del dominio con programas especiales llamados generadores de mallas, en una etapa previa a los cálculos que se denomina pre-proceso. De acuerdo con estas relaciones de adyacencia o conectividad se relaciona el valor de un conjunto de variables incógnitas definidas en cada nodo y denominadas grados de libertad. El conjunto de relaciones entre el valor de una determinada variable entre los nodos se puede escribir en forma de sistema de ecuaciones lineales (o linealizadas), la matriz de dicho sistema de ecuaciones se llama matriz de rigidez del sistema. El número de ecuaciones de dicho sistema es proporcional al número de nodos.

Típicamente el método de los elementos finitos, se programa para calcular el campo de desplazamientos y posteriormente a través de relaciones cinemáticas y constitutivas las deformaciones y tensiones respectivamente, cuando se trata de un problema de mecánica de sólidos deformables o más generalmente un problema de mecánica de medios continuos. El método de los elementos finitos es muy usado debido a su generalidad y a la facilidad de introducir dominios de cálculo complejos (en dos o tres dimensiones). Además el método es fácilmente adaptable a problemas de difusión del calor, de mecánica de fluidos para calcular campos de velocidades y presiones (fluidodinámica CFD) o de campo electromagnético. Dada la imposibilidad práctica de encontrar la solución analítica de estos problemas, con frecuencia en la práctica ingenieril los métodos numéricos, y en particular los elementos finitos se convierten en la única alternativa práctica de cálculo.

Una importante propiedad del método es la convergencia, si se consideran particiones de elementos finitos sucesivamente más finas la solución numérica calculada converge rápidamente hacia la solución exacta del sistema de ecuaciones.



## 4.5 Aplicaciones de CFD

Las posibilidades de aplicación de la CFD a distintos procesos son enormes. Algunos ejemplos son:

- Sistemas de calefacción, ventilación, climatización y refrigeración
- Aeroespacial/Defensa: perfiles de alas, misiles y estudios de aerodinámica externa
- Industria agroalimentaria: procesado y envasado de alimentos, diseño de equipos
- Industria automoción: aerodinámica, combustión en motores, componentes
- Energía: petróleo, gas, nuclear, generación eléctrica, turbomaquinaria, células de combustible
- Industria química: combustión, filtración, mezcla, separadores, reactores
- Industria electrónica: semiconductores, enfriamiento de elementos
- Industria biomédica
- Industria naval
- Industrias del metal
- Industria deportiva: automovilismo, vela, estadios
- Medio ambiente

## 4.6 Ventajas y desventajas del método CFD

Las ventajas de la CFD son que predice las propiedades del fluido con gran detalle en el dominio estudiado, ayuda al diseño y al prototipaje y soluciones rápidas evitando costosos experimentos, se obtiene una visualización y animación del proceso en términos de las variables del fluido.

Por el contrario las desventajas son que requiere usuarios con amplia experiencia y formación especializada, consume recursos de hardware y software que requieren inversiones significativas, en algunos casos, el coste computacional es elevado.



## 5. APLICACIONES INFORMÁTICAS DISPONIBLES

### 5.1 Contexto

En el campo de la simulación de fluidos asistida por computador encontramos una amplia variedad de aplicaciones, de forma que para optimizar nuestras simulaciones debemos saber escoger entre esta amplia gama cual de los simuladores esta mas y mejor orientado a nuestros propósitos. En este apartado enumeraremos todos los recursos a este fin disponibles en el mercado a fecha de hoy y comentaremos brevemente los mas extendidos puesto que la estandarización de simulaciones también es un factor a tener en cuenta, es decir, una simulación realizada por nosotros con un determinado software debe poder ser interpretada por otro ente que cuente con el mismo software. De nada nos servirá una brillante simulación que no podamos exportar ni debatir con otro cliente o socio.

### 5.2 Listado completo de aplicaciones disponibles en el mercado

A continuación se adjunta el listado de aplicaciones completo existentes en el mercado con una breve descripción adjunta.

PROGRAMA	TIPO	DESCRIPCIÓN
ACUSOLVE	2	Contactar al vendedor para información
AVUS	1,4	Contactar al vendedor para información
CFD ++	4	Exporta casos en formato EnSight
CFD-ACE	2	Contactar al vendedor para el lector Data Transfer File
CFD-FASTRAN	2	Contactar al vendedor para el lector Data Transfer File
CFDESIGN	1	Usa lectores y archivos Tecplot
CFX	1,3,4	Lectores directos para CFX4 y CFX5, exporta en EnSight
CFX-TASCflow	3	Convierte salida TASCflow en EnSight
CGNS	3	Lector de usuarios
COBALT	1,4	Lector de usuarios definidos (ver AVUS)



CRAFT	4	Exporta casos EnSight en formato Gold
CRUNCH	4	Exporta casos EnSight en formato Gold
EDEM	4	Exporta casos en formato EnSight
ESTET	1	Lector interno directo
FAST unstructur	1	Lector directo para formato NASA FAST
FEFLO	3	Contactar al vendedor para información
FENSAP	4	Contactar al vendedor para información
FIDAP	1	Lector directo para ficheros FIDAP neutral
FINE/AERO/TURB O	1	Usa ficheros Plot3D o CGNS
FIRE	4	Exporta formato EnSight
FLOW-3D	1	Usuario definido para ficheros FLOW-3D de resultados
FLUENT	1,3,4	Lector directo y exporta casos EnSight
FOAM/OPENFOAM	2,4	Incluye lector y exportador de casos EnSight
GASP	4	Exporta casos en formato EnSight
GUST	4	Exporta casos en formato EnSight
KIVA-3	2,3,4	Rutinas de conversión, exporta formato EnSight-5
KIVA-4	4	Exporta casos en formato EnSight-5
NCC	2	Interface Nacional Combustión Code
N3S	1	Código EDF N3S
NSMB	2	Lector de usuarios definidos desarrollado por CERFACS
NSU2D/NSU3D	4	Contactar al vendedor para información
PAM-FLOW	2	Lector de usuarios definidos desde ESI para ficheros P-F



PHOENICS	1	Usa lector y ficheros PLOT3D
PLOT3D	1	Lector directo de ficheros PLOT3D y formato FAST
Polyflow	4	Exporta formato de casos EnSight
PowerFlow	3	Contactar al vendedor para información
RADIOSS-CFD	1	Contactar MCUBE para detalles de interface
SCRYU	1	Lector de usuarios definidos
SC/TETRA	4	Exporta formato de casos EnSight
Star-CD	4	Exporta formato de casos EnSight
TECPLOT	1	Lector de usuarios definidos TECPLOT y ASCII
UH3D	4	Contactar al vendedor para información
UNCLE	2	Lector de usuario definido, contactar CEI para detalles
UNIC-CFD	3	Contactar al vendedor para información
TetrUSS/USM3D	3	Usa traductor para casos EnSight
VECTIS	1,3	Lector de usuarios definidos
WIND/CFF	1	Formato de ficheros WIND, Sun, SGI & LINUX

Tabla 5.2-1 Aplicaciones disponibles en el mercado

TIPO 1: Lectores incluidos, estos son accesibles mediante selección del formato deseado en el dialogo del lector de datos. Los lectores pueden ser internos para casos EnSight o mediante interface.

TIPO 2: Lectores de usuarios definidos no incluidos, estos son lectores escritos por los clientes o vendedores usando “usuario definido” API. Tienen la ventaja de no requerir una traducción de datos separada lo que ahorra consumos de recursos y espacio en disco de la maquina.

TIPO 3: Traductores “stand –alone”, estos están escritos por los clientes o los vendedores para convertir datos en casos EnSight. Muchos traductores están provistos con formato





EnSight. Los traductores deben ser compilados primero para después poder usarse, algunos requieren enlace a librerías provistas por el vendedor del programa en cuestión.

TIPO 4: Formato EnSight, Estos son software que soportan el formato EnSight de forma directa.

Por las especiales características de aplicabilidad a la problemática ATEX, a continuación se describen las aplicaciones COMSOL y FLUENT.

La elección de uno u otro programa para el estudio de nuestros caso no depende directamente de esta descripción pero si es importante tenerla en cuenta en el momento de compartir los casos estudiados con otras entidades. En el caso de este proyecto se ha utilizado FLUENT, que como puede observarse por su clasificación incluye lector de casos, traductor de casos EnSight (otros formatos) y lector directo de los casos EnSight, lo que lo hace muy versátil a la hora de compartir datos con otros usuarios. Concretamente en este proyecto no se ha hecho mucho hincapié en el compartir datos pero si ha sido útil en situaciones de aprendizaje y discusión con otros proyectos que se están llevando a cabo como el estudio de jetfires o BLEVES. La elección de FLUENT ha sido correcta bajo este prisma.

## 5.3 Comsol

### 5.3.1 Descripción

El módulo de ingeniería química, Chemical Engineering Module, proporciona una manera potente de modelar procesos y equipos en el campo de ingeniería química por medio de una interfaz interactiva de uso gráfico. Se caracteriza por sus aplicaciones para transporte de masa, calor y momentum agrupados con reacciones químicas en geometría 1 D, 2 D y 3 D. El módulo de ingeniería química aplica la tecnología más reciente para solucionar ecuaciones parciales diferenciales (PDEs) a su experiencia en ingeniería química.

### 5.3.2 Visión general

El módulo de ingeniería química, Chemical Engineering Module, combina el poder y la facilidad de uso de COMSOL Multiphysics con su experiencia en ingeniería química. Proporciona una interfaz estandarizada para problemas que involucran transporte de momentum, masa y calor agrupados con reacciones químicas. Ofrece un ambiente de modelación único y lógicamente estructurado para la manipulación de la tecnología más reciente en modelación de ecuaciones parciales diferenciales (PDEs) en ingeniería química. Sistemas axisimétricos y Cartesianos pueden ser modelados para casos estacionarios y dependientes del tiempo. El módulo se divide en los sistemas siguientes:



- Equilibrio de momentum
  - Ecuaciones Navier-Stokes
  - La ecuación Brinkman
- Equilibrio de masa
  - Difusión
  - Convección y difusión
- Equilibrio de energía
  - Conducción de calor
  - Convección de calor y conducción

En estas aplicaciones, puede especificar las propiedades físicas que aparecen en las ecuaciones y se formulan automáticamente los PDEs. Las ecuaciones coeficientes pueden ser funciones arbitrarias de las variables modeladas y sus derivados. Puede usar éstas aplicaciones mientras mantenga la flexibilidad total de modelación definiendo sus propias ecuaciones.

### 5.3.3 Áreas de aplicación

El Módulo de Ingeniería Química se puede usar en un campo amplio de aplicaciones. Algunos de estas áreas son:

- Ingeniería de reacciones y diseño
  - Diseño de reactor en reactores no homogéneos
  - Catálisis heterogéneo
  - Dinámica de fluido en reactores químicos
- Proceso de separación
  - Filtración
  - Diálisis y electrodiálisis
- Ingeniería electroquímica
  - Células de combustible y baterías
  - Electrólisis
  - Corrosión
- Control de proceso en conjunción con Simulink
  - Diseño de sistemas de control
  - Modelación de sistema





Fig. 5.3.3-1 Detalle de la simulación con COMSOL (antes FEMLAB)

## 5.4 Fluent/Gambit

Gambit es un programa que se utiliza para generar la malla de un volumen finito o de control. Este nos permite introducir por coordenadas los puntos que delimitan ese volumen de control, así como los elementos estructurales que pueden estar incluidos.

Una vez realizado el malla de la geometría exportaremos este fichero o bien en formato neutral (adquirible por muchos simuladores) o bien en formato \*.cas compatible con fluent.

En el ANEXO B se explica con todo detalle el funcionamiento del programa Gambit.

Fluent es un software de simulación CFD ampliamente utilizado en la industria, centros de investigación y universidades. Fluent usa una tecnología de mallado no estructurado, es decir la malla consiste de elementos como cuadriláteros y triángulos en simulaciones 2D, de hexaedros, pirámides, prismas y tetraedros en simulaciones 3D. Los esquemas de solución robustos y de métodos numéricos avanzados, garantizan resultados precisos. Las capacidades incrementadas de procesamiento paralelo, disponibles en plataformas NT, Linux y Unix, pueden usarse en múltiples procesadores ya sea en una computadora o en una red de computadoras.

En el ANEXO C se explica con todo detalle el funcionamiento del programa Fluent.



## 6. APLICACIÓN A CASOS PRACTICOS

### 6.1 Introducción

El motivo que impulsa el reto de simular atmósferas explosivas mediante CFD es que hoy en día en la industria tenemos pocos métodos y ellos son empíricos para demostrar el alcance de una determinada área clasificada como inflamable o explosiva.

El estudio de esta situación nos obliga a abordar el problema partiendo de la disección dicotómica del alcance del mismo, es decir, que se debe realizar un planteamiento de que casos son los mas representativos para analizar y cuales debemos excluir por carecer de importancia. Así pues en la mayoría de operaciones de la industria involucradas con atmósferas explosivas, se pueden distinguir tres variantes bien diferenciadas. Esto es operaciones de VENTEO, emanaciones de CHARCOS y finalmente EMISIONES por escape. Se explican con detalle a continuación:

En las operaciones de venteo nos encontramos en su mayoría carga y descarga de depósitos, que mayormente suelen ser estandarizados, por lo que como escenarios de simulación se ha estudiado la tasa de emisión que desprende un bidón de 200 litros y otro de 1000 litros durante la operación de llenado, y la respectiva atmósfera inflamable generada. Además y como parte del estudio de estos casos hemos incluido la interacción con una campana extractora para ver la reducción de dicha atmósfera inflamable.

En los charcos, o digamos en las emisiones liquidas precipitadas, se generan también por vaporización de la sustancia implicada unas zonas de alto riesgo inflamable, cuyas concentraciones están comprendidas entre el limite superior de inflamabilidad y el limite inferior. Como ejemplo de ello podemos tener desde el derrame de una cuba hasta el derrame de una etiquetadora que use disolventes. También en este caso se ha estudiado la interacción con una campana extractora genérica, de forma que podremos ver como se comporta la atmósfera bajo su influencia.

Finalmente y ocasionalmente se dan situaciones de emisión no deseada a presión de ciertos compuestos que van canalizados y cuyas fugas producen dardos que pueden originar llamaradas o dardos de fuego. Estas emisiones han sido estudiadas mediante simulación con CFD en dos casos bastante similares pero a la vez diferentes. LA diferencia radica en el tamaño del orificio de escape. En este caso es absurdo pensar que una campana pueda estar enfocada delante del punto de escape en el preciso momento en que este se produce, por lo que su interacción no se ha considerado.



Las geometrías del volumen del control siempre serán las mismas para facilitar la labor comparativa y de análisis de resultados. Estamos hablando de una habitación que por defecto tiene una entrada y una salida de aire que utilizaremos a modo de ventilación natural o forzada. Sobre esta malla genérica incluiremos campanas, charcos y puntos de emisión. En total se realizara el estudio sobre 8 casos simplificados de complejidad relativa pero a la vez muy ilustrativos de cómo se comporta el fluido en condiciones laminares y turbulentas. Finalmente deberemos contrastar los resultados obtenidos mediante la simulación con los resultados obtenidos de forma empírica mediante tablas y formulas, solo así podremos demostrar la validez de nuestra simulación.

Todos los casos anteriores pueden ser tratados como una fuente de escape caracterizada por un valor de fuga de emisión (kg/s) y una geometría de escape (orificio, área) por dónde emana el vapor y un recinto con ventilación.

	CASO BÁSICO	CASO AMPLIADO
Emisión desde un charco	<b><i>CASO sin campana extractora</i></b>	<b><i>CASO con campana extractora</i></b>
Emisión durante la operación de llenado de un deposito tipo bidón 200 litros	<b><i>CASO sin campana extractora</i></b>	<b><i>CASO con campana extractora</i></b>
Emisión durante la operación de llenado de un deposito tipo GRG 1000 litros	<b><i>CASO sin campana extractora</i></b>	<b><i>CASO con campana extractora</i></b>
Escape de gas foco puntual diámetro 2 mm	<b><i>CASO sin campana extractora</i></b>	---
Escape de gas foco puntual diámetro 5 mm	<b><i>CASO sin campana extractora</i></b>	---

TABLA 6.1-1 Casos de estudio.

El caso básico da respuesta a la situación de escape en un recinto ventilado de 5 X 3 X 10 metros. El caso ampliado introduce un elemento de extracción local que intensifica la renovación de aire en el punto de escape o emisión.



En todos ellos se seguirá el esquema siguiente:

- DEFINICIÓN DE LA GEOMETRÍA
- DEFINICIÓN DE LAS CONDICIONES DE OPERACIÓN
- CARACTERIZACIÓN DE LA FUENTE DE ESCAPE
- PARAMETROS DE SIMULACIÓN
- OBTENCION DE RESULTADOS
- CONCLUSIÓN

## 6.2 Caso bidón de tolueno

### 6.2.1 Definición de la geometría

En el caso que nos ocupa la geometría es una sencilla estancia de 10 X 5 X 3 metros con dos aberturas a modo de puerta en ambos lados contrapuestos de 0.8 x 2 metros. Situado en el centro disponemos de un bidón estandarizado de 200 litros con una boca de diámetro 0.05 metros circular excéntrica respecto el eje central del bidón.

La realización de esta malla ha tenido en cuenta un grosor diferencial en todas aquellas zonas en las que hay entrada o salida de flujo de cualquier naturaleza, pues de esta forma contamos con una distribución correcta y definida de elementos finitos en el origen de estos flujos. La densidad de este mallado disminuye según se adentra en el volumen de control de forma que es más densa en las regiones de estudio y menos densa donde estas zonas carecen de interés.

### 6.2.2 Definición de las condiciones de operación

Las condiciones de operación son las referidas a continuación: Temperatura del volumen de control o estancia homogénea de 293 K (20 °C), Presión absoluta de 101325 Pa (la atmosférica), Compuesto de estudio TOLUENO, confinado dentro del bidón y que emana según la tasa de emisión calculada en la operación de carga/descarga por la boca del mismo. El compuesto esta en forma liquida en el interior del bidón y su emanación se produce con vapores a su Presión de saturación.

### 6.2.3 Caracterización de la fuente de escape

Las condiciones de contorno son las enumeradas a continuación:

PUERTAS, de entrada y de salida, con un flujo convectivo en la dirección del eje +X y una velocidad de 2 m/s



BIDON, que emana tolueno con la tasa de emisión calculada de la siguiente forma:

Tiempo de operación 66.6 segundos

$$L_w = 0.001 \cdot M_v \cdot P_{VA} \cdot Q \cdot K_N \cdot K_P \quad (\text{Ec. 6.2.3-1})$$

$$M_v = 92.1 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1} = 92.1 \text{ lb} \cdot \text{lbmol}^{-1}$$

$$P_{VA} = 2900 \text{ Pa} = 0.4206 \text{ psia}$$

$$Q = 200 \text{ l} = 1.2579 \text{ bbl} \cdot \text{operación}^{-1}$$

$$K_N = 1 \text{ (atmosfera saturada)}$$

$$K_P = 1 \text{ (disolvente orgánico)}$$

$$L_w = 0.001 \cdot 92.1 \cdot 0.4206 \cdot 1.2579 \cdot 1 \cdot 1 = 0.04872 \text{ lb} \cdot \text{operación}^{-1} \quad (\text{Ec. 6.2.3-2})$$

$$L_w = 22.1024 \text{ g} \cdot \text{operación}^{-1} \quad (\text{Ec. 6.2.3-3})$$

$$L_w = \frac{22.1024}{66.67} = 0.33152 \text{ g} \cdot \text{s}^{-1} \quad (\text{Ec. 6.2.3-4})$$

$$U_{Boca} = \frac{\frac{0.33152 \text{ g} \cdot \text{s}^{-1}}{3910 \text{ g} / \text{m}^3}}{\pi \cdot 0.05^2 \text{ m}^2} = 1.07955 \cdot 10^{-2} \text{ m} \cdot \text{s}^{-1} \quad (\text{Ec. 6.2.3-5})$$

#### 6.2.4 Parámetros de simulación

La simulación se ha realizado en condiciones turbulentas de ecuación k-epsilon, partiendo la simulación de la boca del bidón como región inicial de iteración, con aproximadamente 300 iteraciones donde se ha tenido que interrumpir la simulación en el resultado optimo pues los residuales se desestabilizaban. Tiempo aproximado de la simulación 3 horas y cuarto. La concentración inicial de Tolueno en el volumen de control es de 0 % o aire pues no existe hasta que emane del bidón.

En la simulación se representan las concentraciones existentes entre el Limite Inferior de Inflamabilidad y el Limite Superior de Inflamabilidad (LII y LSI respectivamente), cuyos valores son LII = 0.01% y LSI = 0.068 % [5].



### 6.2.5 Obtención de resultados

Tras realizar la simulación obtenemos unos resultados gráficos bastante relevantes. Se puede observar en las siguientes figuras como el tolueno por ser más denso que el aire discurre por encima de la superficie del Bidón y no se dispersa por la atmósfera de la habitación, incluso tiende a derramarse por la pared vertical del bidón más cercana de la boca, que recordemos que esta desplazada del eje central del bidón y por tanto es excéntrica. Esto motiva que la atmósfera generada por el venteo de la carga/descarga del bidón esté también desplazada respecto a su eje central. La interacción del fenómeno de convectivo proveniente de la circulación de aire entre las puertas es mínimo, pues este se encuentra en régimen laminar debido a su baja tasa de renovación y por tanto no arrastra la atmósfera de tolueno permitiendo que esta se desarrolle libremente.

En la figura segunda se puede apreciar un corte longitudinal de la atmósfera resultante aumentada. En este corte se observa claramente las zonas o superficie cercana a la boca (en azul) correspondiente al limite superior de inflamabilidad, pues es la superficie de mayor concentración, y a medida que esta atmósfera se dispersa la concentración disminuye y alcanzamos el limite inferior de inflamabilidad (en amarillo). El valor de estos limites para el tolueno es de 1% (LII) y del 6,8% (LSI) [5]. Vale la pena hacer mención de por que no resulta una atmósfera inflamable justo en la salida de la boca produciéndose una zona no inflamable entre la boca y el LSI, pues bien, esto es debido por que la concentración de oxigeno en este pequeño volumen no es suficiente para que se produzca la reacción de combustión. Esto no nos asegura que en caso de que se inflamase la atmósfera generada la deflagración se propagase al interior del bidón alcanzando el tolueno líquido.

Se debe comentar que a pesar de estar en una situación de ventilación laminar, la simulación se ha realizado a partir de la boca hacia el resto de la estancia (cálculos iniciales a partir de la malla de la boca) en situación de régimen turbulento. El motivo de esta elección es el siguiente, si resultase una atmósfera explosiva que progresa de forma turbulenta y la definimos como laminar el simulador no tendría en cuenta este handicap y con toda seguridad los resultados no reflejarían la realidad. Mientras que de la forma inversa, definiendo régimen turbulento y en realidad siendo laminar, no obviamos posibles resultados que puedan aparecer debidos al régimen turbulento. De esta forma, el simulador que no trabaja con los dos regimenes simultáneamente (si lo hacen versiones posteriores que aun no se han lanzado al mercado), nos obliga a tener en cuenta este parámetro y a trabajar curándonos en salud, aun a costa de simulaciones mas pesadas y largas.





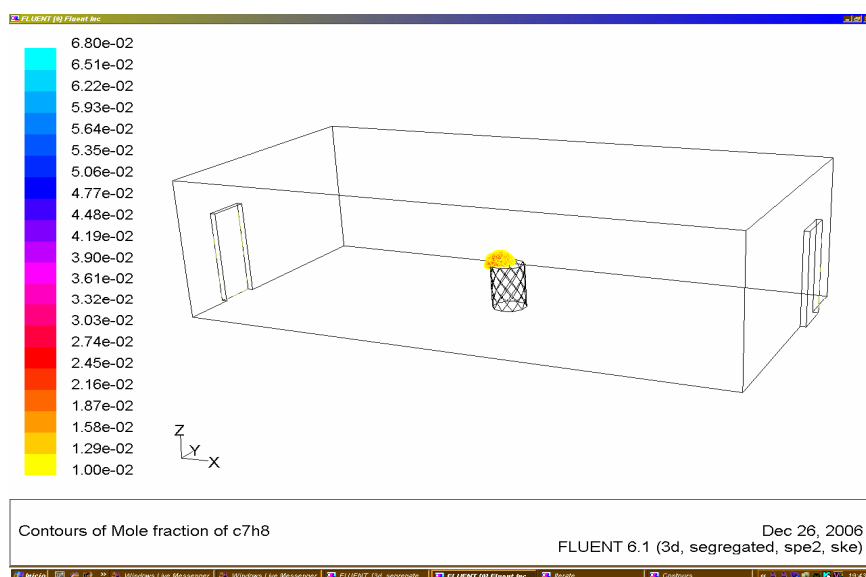


Fig. 6.2.5-1. Atmósfera explosiva durante la carga/descarga del bidón 200 litros

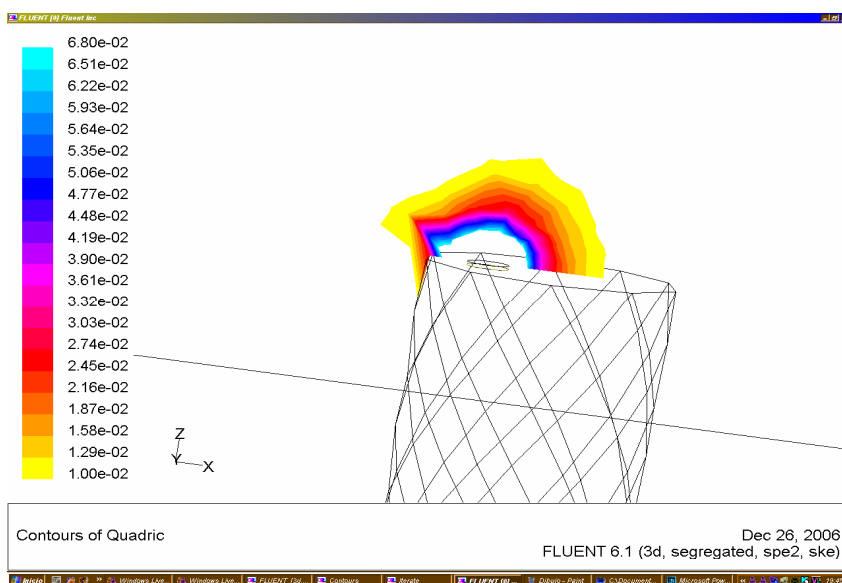


Fig. 6.2.5-2. Detalle del corte transversal de la atmósfera explosiva



### 6.2.6 Conclusión

Como resultado del estudio de este caso podemos afirmar que la simulación es bastante coherente con lo que los pictogramas marcan, es decir, que consideran una atmósfera inflamable de una esfera de un metro de radio alrededor. La simulación demuestra que la heurística no es errónea, pero si que a su vez es conservadora, pues es difícil establecer los pictogramas de forma experimental con este nivel de precisión. En caso de haber obtenido una simulación que revelara que la atmósfera inflamable es mayor que la ofrecida por el método de los pictogramas nos veríamos obligados a rechazarla y por tanto a revisar de nuevo nuestras condiciones de operación, contorno y parámetros de simulación, para finalmente poder obtener un resultado fehaciente con la realidad.

## 6.3 Caso GRG de Tolueno (Gran Recipiente a Granel)

### 6.3.1 Definición de la geometría

En este caso la geometría es una sencilla estancia de 10 X 5 X 3 metros con dos aberturas a modo de puerta en ambos lados contrapuestos de 0.8 x 2 metros, tal y como se definió en el caso anterior. Situado en el centro disponemos de un recipiente tipo GRG estandarizado de 1000 litros con una boca de diámetro 10 centímetros circular alineada con respecto al eje central del GRG.

### 6.3.2 Definición de las condiciones de operación

Las condiciones de operación son las referidas a continuación: Temperatura del volumen de control o estancia homogénea de 293 K (20 °C), Presión absoluta de 101325 Pa (la atmosférica), compuesto de estudio TOLUENO, confinado dentro del recipiente GRG y que emana según la tasa de emisión calculada en la operación de carga/descarga por la boca del mismo. El compuesto está en forma líquida en el interior del GRG y su emanación se produce con vapores a su Presión de saturación.

### 6.3.3 Caracterización de la fuente de escape

Las condiciones de contorno son las enumeradas a continuación:



PUERTAS, de entrada y de salida, con un flujo convectivo en la dirección del eje +X y una velocidad de 2 m/s

BIDÓN, que emana tolueno con la tasa de emisión calculada de la siguiente forma:

Tiempo de operación 333.3 segundos

$$L_W = 0.001 \cdot M_V \cdot P_{VA} \cdot Q \cdot K_N \cdot K_P \quad (\text{Ec. 6.3.3-1})$$

$$M_V = 92.1 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1} = 92.1 \text{ lb} \cdot \text{lbmol}^{-1}$$

$$P_{VA} = 2900 \text{ Pa} = 0.4206 \text{ psia}$$

$$Q = 200 \text{ l} = 1.2579 \text{ bbl} \cdot \text{operación}^{-1}$$

$$K_N = 1 \text{ (atmosfera saturada)}$$

$$K_P = 1 \text{ (disolvente orgánico)}$$

$$L_W = 0.001 \cdot 92.1 \cdot 0.4206 \cdot 6.2898 \cdot 1 \cdot 1 = 0.24364 \text{ lb} \cdot \text{operación}^{-1} \quad (\text{Ec. 6.3.3-2})$$

$$L_W = \frac{110.5176}{333.333} = 0.33155 \text{ g} \cdot \text{s}^{-1} \quad (\text{Ec. 6.3.3-3})$$

$$U_{Boca} = \frac{\frac{0.33155 \text{ g} \cdot \text{s}^{-1}}{3910 \text{ g} / \text{m}^3}}{\pi \cdot 0.1^2 \text{ m}^2} = 2.69914 \cdot 10^{-3} \text{ m} \cdot \text{s}^{-1} \quad (\text{Ec. 6.3.3-4})$$

#### 6.3.4 Parámetros de la simulación

La simulación se ha realizado en condiciones turbulentas de ecuación k-epsilon, partiendo la simulación de la boca del recipiente GRG como región inicial de iteración, con aproximadamente 350 iteraciones donde se ha tenido que interrumpir la simulación en el resultado óptimo pues los residuales se desestabilizaban. Tiempo aproximado de la simulación 4 horas. La concentración inicial de Tolueno en el volumen de control es de 0 % o aire pues no existe hasta que emane del GRG. En la simulación se representan las concentraciones existentes entre el Límite Inferior de Inflamabilidad y el Límite Superior de Inflamabilidad (LII y LSI respectivamente), cuyos valores son LII = 0.01% y LSI = 0.068 %.

#### 6.3.5 Obtención de resultados



De la misma forma que habíamos estudiado el caso de emanación de vapores inflamables en el caso del Bidón, en el caso que nos ocupa sucede algo similar pero con algunas variaciones. En primer lugar la atmósfera generada por la carga/descarga del GRG es mayor que la del bidón, y esto es debido a que hay más cantidad de tolueno confinada dentro del recipiente y su boca es mayor. De nuevo la atmósfera es más densa que el aire y discurre por la superficie del depósito. Ahora si podemos observar una interacción leve con la corriente de ventilación convectiva que desplaza ligeramente esta atmósfera en el sentido de la corriente de forma que discurre en parte por la pared lateral del depósito.

Si observamos un corte longitudinal podemos apreciar de nuevo como quedan definidas las superficies correspondientes al LSI y al LII que tiene el mismo valor invariable que en el caso anterior. Se aprecia también como la región entre la boca y la superficie del LSI es superior pues hay más cantidad de compuesto que emana.

Se ha decidido estudiar este tipo de depósito para precisamente estudiar junto con el caso anterior dos tipos de depósito de geometrías diferentes para poder contemplar la diferente interacción de la atmósfera inflamable con la geometría implicada.

De nuevo, en esta simulación haremos mención de que se ha decidido emplear un régimen turbulento ante la posibilidad de obviar resultados en caso de tomar como parámetro de simulación el régimen laminar.



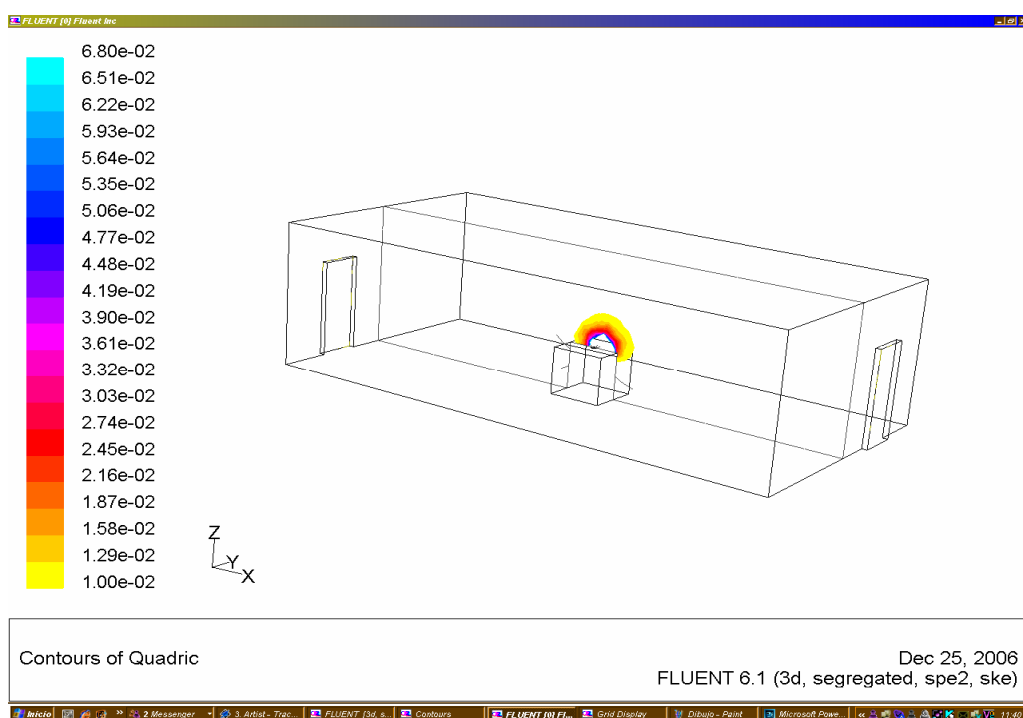


Fig. 6.3.5-1. Sección transversal de la atmósfera explosiva del GRG (carga/descarga)

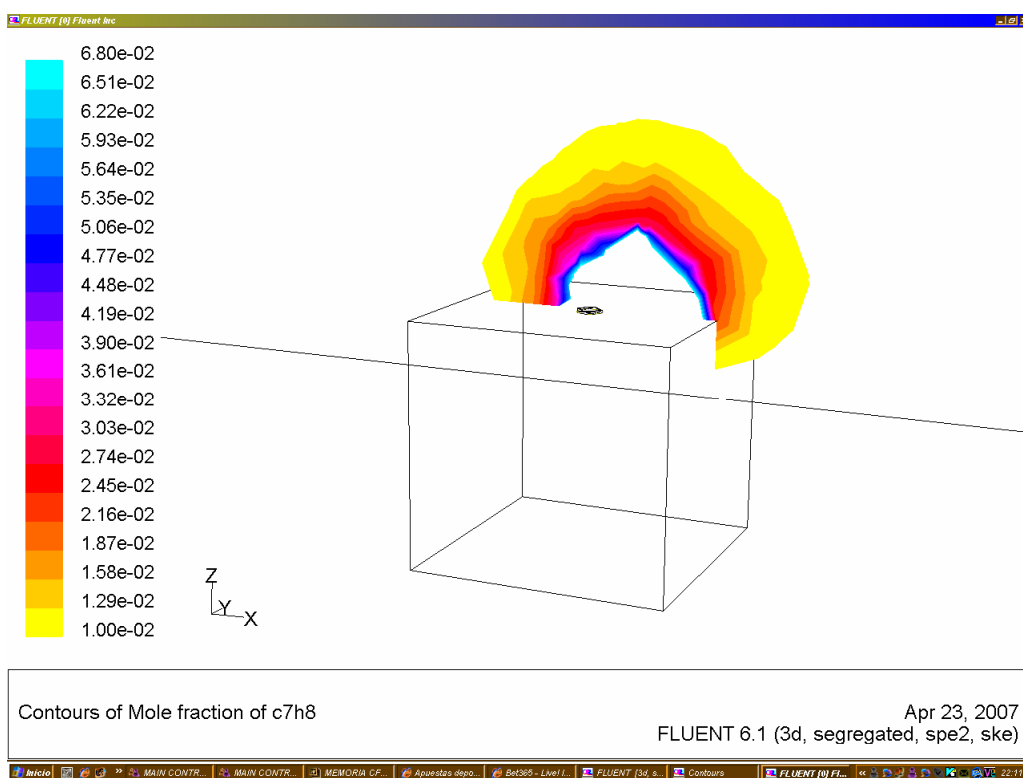


Fig. 6.3.5-2. Detalle de la sección atmósfera inflamable del GRG



### 6.3.6 Conclusión

Podemos concluir de igual modo que en el caso del bidón solo que hay que hacer referencia a las diferencias de la atmósfera inflamable, producidas principalmente por la variación en la geometría del depósito.

## 6.4 Caso bidón de tolueno con campana

### 6.4.1 Definición de la geometría

Geometría sencilla compuesta por una estancia de 10 X 5 X 3 metros con dos aberturas a modo de puerta en ambos lados contrapuestos de 0.8 x 2 metros, tal y como se definió en el caso anterior. Situado en el centro disponemos de un bidón estandarizado de 200 litros con una boca de diámetro 5 centímetros circular excéntrica con respecto al eje central del bidón. La geometría también cuenta con una campana extractora que evacua al techo de la estancia. Tiene un tramo vertical y uno oblicuo a 45° enfocado directamente a la boca del bidón para succionar la atmósfera inflamable generada. El diámetro de la boca de la campana es de 20 centímetros.

### 6.4.2 Definición de las condiciones de operación

Las condiciones de operación son las mismas que en caso del Bidón sin campana, es decir: Temperatura del volumen de control o estancia homogénea de 293 K (20 °C), Presión absoluta de 101325 Pa (la atmosférica), Compuesto de estudio TOLUENO. La Campana aspirará a 7.95 m/s

### 6.4.3 Caracterización de la fuente escape

Las condiciones de contorno son las enumeradas a continuación:

PUERTAS, de entrada y de salida, con un flujo convectivo en la dirección del eje +X y una velocidad de 2 m/s

BIDÓN, que emana tolueno con la tasa de emisión calculada de la siguiente forma:

Tiempo de operación 66.67 segundos

$$L_w = 0.001 \cdot M_V \cdot P_{VA} \cdot Q \cdot K_N \cdot K_P \quad (\text{Ec. 6.4.3-1})$$



$$M_v = 92.1 g \cdot mol^{-1} = 92.1 lb \cdot lbmol^{-1}$$

$$P_{VA} = 2900 Pa = 0.4206 psia$$

$$Q = 200 l = 1.2579 bbl \cdot operación^{-1}$$

$$K_N = 1 \text{ (atmosfera saturada)}$$

$$K_P = 1 \text{ (disolvente orgánico)}$$

$$L_w = 0.001 \cdot 92.1 \cdot 0.4206 \cdot 1.2579 \cdot 1 \cdot 1 = 0.04872 lb \cdot operación^{-1} \quad (\text{Ec. 6.4.3-2})$$

$$L_w = \frac{22.1024}{66.67} = 0.33152 g \cdot s^{-1} \quad (\text{Ec. 6.4.3-3})$$

$$U_{Boca} = \frac{\frac{0.33152 g \cdot s^{-1}}{3910 \frac{g}{m^3}}}{\pi \cdot 0.05^2 m^2} = 1.07955 \cdot 10^{-2} m \cdot s^{-1} \quad (\text{Ec. 6.4.3-4})$$

Y para la campana tenemos que utilizar las siguientes renovaciones por hora:

$$\frac{A \cdot u}{V} = \frac{(m^2) \left( \frac{m}{s} \right)}{(m^3)} = s^{-1} \quad (\text{Ec. 6.4.3-5})$$

$$\lambda = 0.3 \frac{m^3}{\min \cdot m^2} \cdot \frac{50}{150} \frac{m^2}{m^3} = 0.1 \min^{-1} \quad (\text{Ec. 6.4.3-6})$$

$$\vec{u} = \frac{\lambda \cdot V}{A} = \frac{1.666 \cdot 10^{-3} s^{-1} \cdot 150 m^3}{\pi \cdot 0.1^2 m^2} = 7.9545 \frac{m}{s} \quad (\text{Ec. 6.4.3-7})$$

#### 6.4.4 Parámetros de simulación

Se ha arrancado la simulación desde la zona de la boca del deposito y hacia el resto de la estancia, lo que ha conllevado aproximadamente 300 iteraciones en converger (residuales convergen en  $10 \exp^{-3}$ ). El criterio de convergencia, aunque puede variar, se procura que siempre sea el mismo, aunque dependiendo de la simulación este no se alcanzara aunque si se acercará. Esto es por la presencia de armónicos que estabilizan los mismos



residuales y llevan a la simulación a un resultado matemáticamente posible pero físicamente improbable, por tanto hay que saber discriminar entre unas y otras soluciones atendiendo al conocimiento del comportamiento físico del sistema. La Campana se ha inicializado con una velocidad de aspiración de 7.9545 m/s. La concentración inicial de Tolueno en el volumen de control es de 0 % o aire pues no existe hasta que emane del Bidón. En la simulación se representan las concentraciones existentes entre el Limite Inferior de Inflamabilidad y el Limite Superior de Inflamabilidad (LII y LSI respectivamente), cuyos valores son LII = 0.01% y LSI = 0.068 % [5].

#### 6.4.5 Obtención de resultados

Este caso resulta interesante en su análisis, pues vemos el efecto de la succión hacia la boca de la campana de la atmósfera inflamable. Esta atmósfera se despega de la superficie del bidón para apuntar a integrarse en el torrente de la campana. Pero no solo eso, se observa como el volumen de esta atmósfera disminuye, y la explicación está en que la dispersión en el ambiente se ve entorpecida, pues el compuesto sigue unas líneas de corriente hacia la boca de la campana lo que hacen que las isopletras (o curvas de concentración) se hacen sobre la boca que las emite a mayor concentración. En pocas palabras, que la atmósfera resultante del conjunto es menor y menos dispersada que sin ninguna campana.

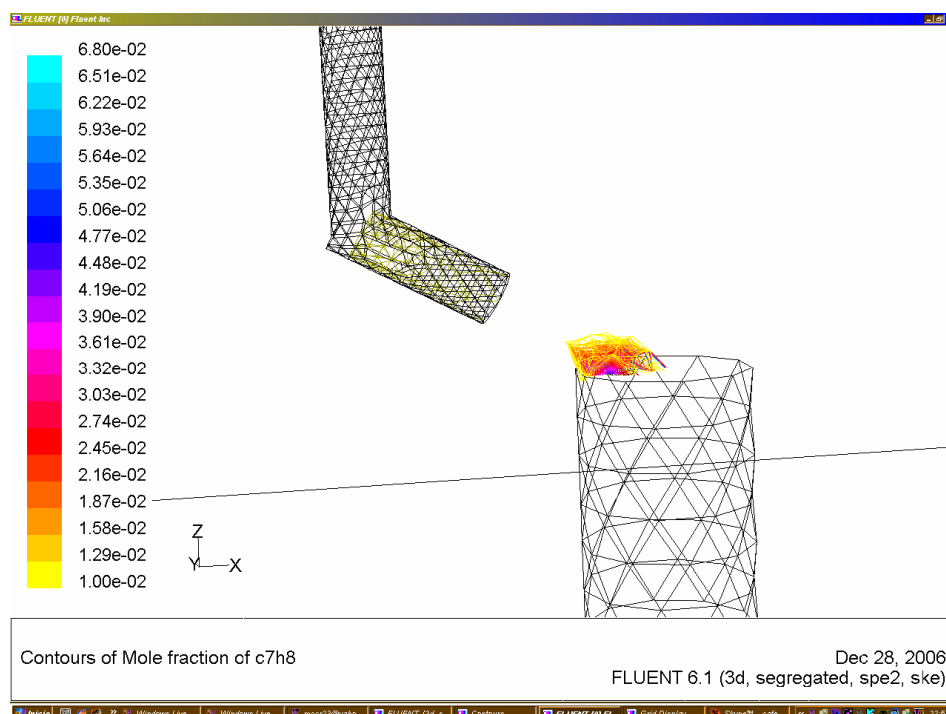


Fig. 6.4.5-1. Atmósfera inflamable bidón 200 litros con campana extractora





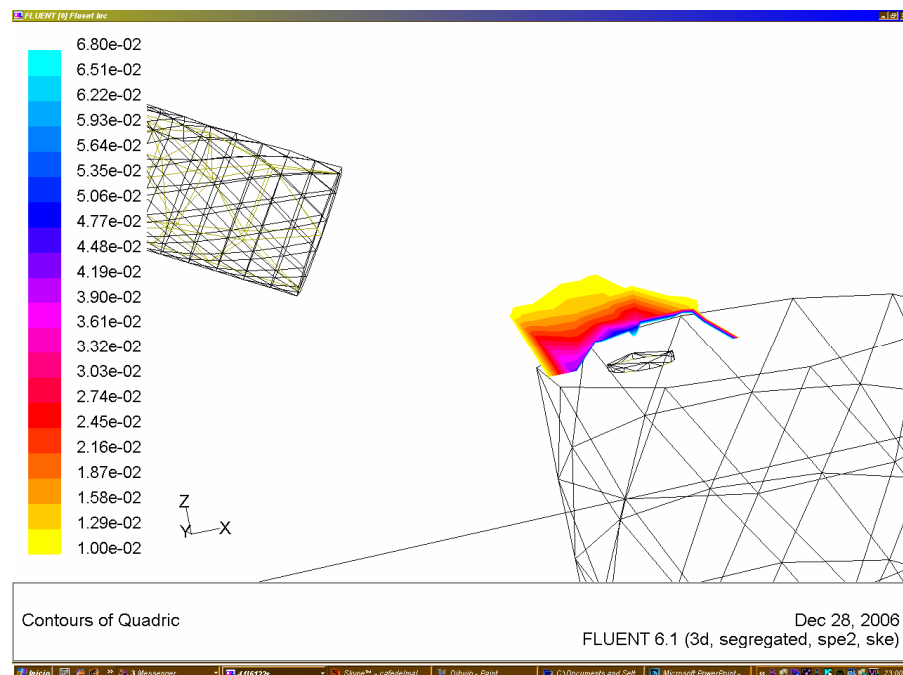


Fig. 6.4.5-2. Detalle de la sección de la atmósfera inflamable

## 6.4.6 Conclusión

Vemos que el comportamiento de la simulación y de su resultado es satisfactorio pues es algo esperado. La visualización en un entorno 3D del mismo resultado nos permite apreciar detalles como el de la formación de un cono de succión hacia la boca de la campana que como veremos en el próximo ejemplo llega hasta su propio interior. El mallado de la campana es hueco en el primer tramo, es decir, que hasta el codo de la campana podemos simular el comportamiento del fluido en su interior. Llegado al codo el fluido se encuentra con la condición de contorno de velocidad de salida. Esto es importante enunciarlo por que esta malla es valida para posteriores simulaciones en las que se quiera apreciar la formación de vértices en su boca. En este caso de nuevo el flujo es laminar y no aparecen rastros ni signos de turbulencia, a pesar de haber empleado el método k-epsilon (turbulento).

## 6.5 Caso GRG de tolueno con campana

### 6.5.1 Definición de la geometría

La geometría de este caso es muy similar a la del caso anterior, de hecho es la combinación entre el caso del deposito GRG i el anterior. Este caso es también interesante por observar como interactúa la atmósfera inflamable con la geometría del deposito bajo la



acción de la campana. Es ahora donde se puede entender el orden de los casos dentro de las tres variantes de interés, de forma que vamos aumentando la complejidad de estudio dentro de si se trata de la emisión por carga/descarga de un depósito, por una fuga a presión o bien por la emanación de vapores de un charco. Si definimos estrictamente la geometría diremos que estamos en una estancia de 10 x 5 x 3 metros con un GRG cúbico de 1000 litros en el centro de la estancia que cuenta con una boca de 10 cm de diámetro en el centro de su eje axial, y que enfocada a esta se encuentra la boca de la campana de aspiración, la misma (a efectos de mallado y succión) que en el caso anterior.

### 6.5.2 Definición de las condiciones de operación

Las condiciones de operación son las mismas que en caso del GRG sin campana, es decir: Temperatura del volumen de control o estancia homogénea de 293 K (20 °C), Presión absoluta de 101325 Pa (la atmosférica), Compuesto de estudio TOLUENO. La Campana aspirará a 7.95 m/s

### 6.5.3 Caracterización de la fuente de escape

Las condiciones de contorno son las enumeradas a continuación:

PUERTAS, de entrada y de salida, con un flujo convectivo en la dirección del eje +X y una velocidad de 2 m/s

GRG, que emana tolueno con la tasa de emisión calculada de la siguiente forma:

Tiempo de operación 333.33 segundos

$$L_w = 0.001 \cdot M_v \cdot P_{VA} \cdot Q \cdot K_N \cdot K_P \quad (\text{Ec. 6.5.3-1})$$

$$M_v = 92.1 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1} = 92.1 \text{ lb} \cdot \text{lbmol}^{-1}$$

$$P_{VA} = 2900 \text{ Pa} = 0.4206 \text{ psia}$$

$$Q = 200 \text{ l} = 1.2579 \text{ bbl} \cdot \text{operación}^{-1}$$

$$K_N = 1 \text{ (atmosfera saturada)}$$

$$K_P = 1 \text{ (disolvente orgánico)}$$

$$L_w = 0.001 \cdot 92.1 \cdot 0.4206 \cdot 6.2898 \cdot 1 \cdot 1 = 0.24364 \text{ lb} \cdot \text{operación}^{-1} \quad (\text{Ec. 6.5.3-2})$$



$$L_w = 110.5176 g \cdot \text{operación}^{-1} \quad (\text{Ec. 6.5.3-3})$$

$$L_w = \frac{110.5176}{333.333} = 0.33155 g \cdot s^{-1} \quad (\text{Ec. 6.5.3-4})$$

$$U_{\text{Boca}} = \frac{\frac{0.33151 g \cdot s^{-1}}{3910 \frac{g}{m^3}}}{\pi \cdot 0.1^2 m^2} = 2.69914 \cdot 10^{-3} m \cdot s^{-1} \quad (\text{Ec. 6.5.3-5})$$

$$\frac{A \cdot \vec{u}}{V} = \frac{(m^2) \left( \frac{m}{s} \right)}{(m^3)} = s^{-1} \quad (\text{Ec. 6.5.3-6})$$

$$\lambda = 0.3 \frac{m^3}{\text{min} \cdot m^2} \cdot \frac{50}{150} \frac{m^2}{m^3} = 0.1 \text{ min}^{-1} \quad (\text{Ec. 6.5.3-7})$$

$$\vec{u} = \frac{\lambda \cdot V}{A} = \frac{1.666 \cdot 10^{-3} s^{-1} \cdot 150 m^3}{\pi \cdot 0.1^2 m^2} = 7.9545 \frac{m}{s} \quad (\text{Ec. 6.5.3-8})$$

#### 6.5.4 Parámetros de simulación

Como en los anteriores casos la simulación ha sido inicializada desde la zona de interés, concretamente desde la boca del deposito GRG. Ha llevado aproximadamente 400 iteraciones obtener el resultado, en un tiempo de tres horas y media, pero estos tiempos siempre están sujetos a la potencia del equipo informático que se esté usando. Las condiciones y parámetros de concentración y velocidad se han verificado en la consola de iniciación (ver anexo C). El resultado obtenido es el descrito a continuación.

#### 6.5.5 Obtención de resultados

En la simulación relativa a este caso podemos observar el efecto de succión de la campana sobre la atmósfera explosiva. Para la misma tasa de emisión se aprecia como la campana extractora produce un efecto de reducción de la emanación de Tolueno. La malla ha sido creada de forma que la boca de la campana no sea ciega sino que el flujo penetre en ella al menos hasta el codo como se comentó anteriormente, de esta forma podemos seguir el flujo en su punto de succión más allá de la propia boca de la campana. Cabe destacar que a pesar de la ventilación por convección natural de las puertas la atmósfera explosiva adopta una forma semiesférica tendiente hacia la boca de la campana extractora. Incluso si nos fijamos en una sección de esta veremos como desde el límite superior de



inflamabilidad (zona coloreada en azul) se percibe dicha tendencia. En parte esto es por que la boca de la campana está orientada hacia la superficie superior del GRG i la boca del mismo, de tal forma que la atmósfera explosiva se ve perfectamente expuesta al efecto de la campana. Se podría pensar que la campana está ejerciendo efecto venturio sobre el depósito y en definitiva es lo que hace. El gradiente de velocidades es superior en las regiones mas cercanas a la campana por lo que se genera una depresión que absorbe la atmósfera emanada del deposito incluso siendo esta más densa que el aire envolvente.

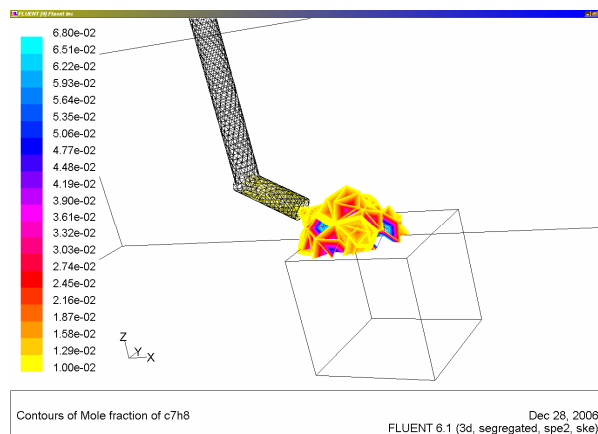


Fig. 6.5.5-1. Atmósfera inflamable GRG con campana extractora

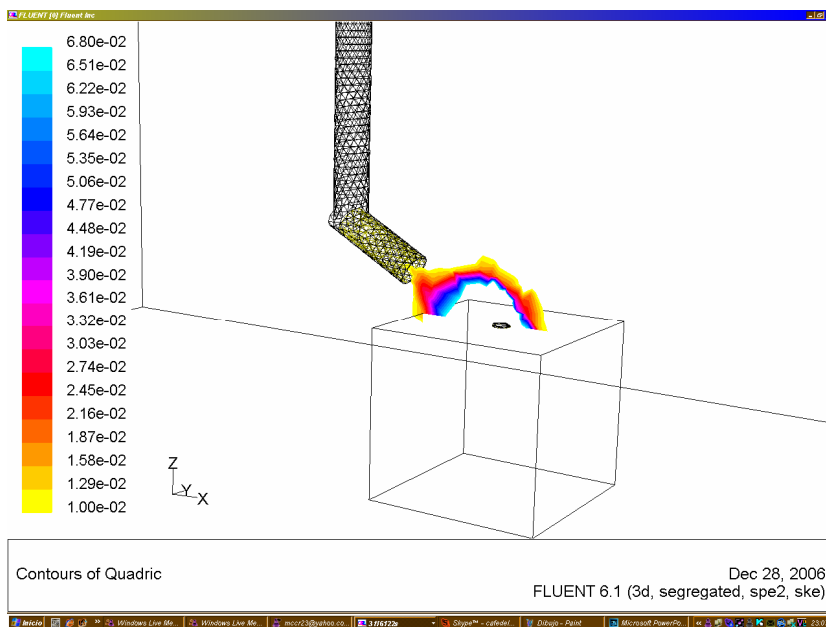


Fig. 6.5.5-2. Detalle de la sección de la atmósfera inflamable GRG con campana



### 6.5.6 Conclusión

De forma muy similar al análisis de la simulación en 3D que hicimos para el caso del Bidón de tolueno con campana, aquí podemos concluir que la simulación nos da un resultado esperado y es satisfactorio pues refleja la reología implicada en el caso resuelto desde las ecuaciones del contexto de turbulencia que prevé Fluent. Como veremos mas tarde en una comparativa con los resultados de tasa de emisión propuestos por el CETIB (Colegio de Ingenieros Técnicos Industriales de Barcelona), nos daremos cuenta de que a pesar de existir una discrepancia en el valor de la tasa calculada si podremos ver que son del mismo orden. Esto tendrá la siguiente consecuencia que ya se explicara debidamente pero que aquí anunciamos ya, y se trata de una comparativa favorable entre la técnica actual de clasificación de zonas por pictogramas y la simulación en CFD.

## 6.6 Escape de gas natural (emisión 2 mm)

### 6.6.1 Definición de la geometría

La definición de la geometría de este caso es muy parecida a la de los anteriores puesto que todos tienen como común denominador la estancia dotada de dos puertas. La diferencia tanto con los anteriores como con los que veremos posteriormente consiste en lo siguiente: Los casos donde estudiamos la emisión de un gas (metano) tienen en su haber un orificio no mallado de geometría cilíndrica con un diámetro de 2 milímetros (para este caso) con su eje orientado de forma horizontal. Cabe explicar esta geometría tan peculiar, ya que este cilindro tan minúsculo no mallado en el interior de la malla de la estancia representa el poro por donde fugará nuestro gas. Precisamente por la condición de fuga (velocity inlet) debe estar sin mallar pues no nos interesa lo que sucede por detrás del punto de fuga pero si por delante del mismo. Para hacernos una idea, el hecho de mallar interiormente el orificio nos aportaría información de lo que sucede con el gas en el punto exacto en el que este atraviesa el grosor de la conducción que lo confina... Véase la figura expuesta a continuación de este mallado.

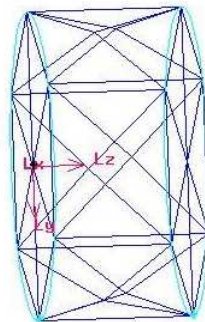


Fig. 6.6.1-1. Mallado del poro



Este orificio se halla ligeramente descentrado respecto al centro de la estancia. De forma que cuando se produzca un dardo de gas este se pueda ver en el centro de la estancia y a su vez se pueda observar la interacción de este con la convección debida al flujo de aire que circula entre las puertas.

#### 6.6.2 Definición de las condiciones de operación

En este caso debemos mencionar las condiciones de operación como las que siguen a continuación: la temperatura del sistema es de 293 K o 20 °C, mientras que la presión de la estancia es de una atmósfera o 1 bar la presión como condición de salida en la superficie del orificio (representa la presión aguas arriba) es de 1.83 bar absoluta o 0.83 bar por encima de la de la estancia. Esta Presión no ha sido escogida al azar, es la presión límite entre el régimen subsónico y el régimen sónico, de forma que la emanación se produce a exactamente 1.034 Mach como veremos más tarde. La velocidad de salida del fluido, en este caso metano puro, por el orificio en estas condiciones de Mach es de 465.25 m/s. La ventilación entre las dos puertas se establece como un flujo a una velocidad de 0.5 m/s en sentido contrario a las X, de forma que los flujos serán equicorrientes.

#### 6.6.3 Caracterización de la fuente de escape

Para caracterizar la fuente de escape debemos atender a las siguientes ecuaciones:

Condición Choquet o non choquet si cumple la inecuación siguiente:

$$\left( \frac{P_{source}}{P_{amb}} \right) < \left( \frac{k+1}{2} \right)^{\frac{k}{k-1}} \quad (\text{Ec. 6.6.3-1})$$

Entorno choquet:

$$Q = C \cdot A \cdot \sqrt{k \cdot \rho \cdot P \cdot \left[ \left( \frac{2}{k+1} \right)^{\frac{k+1}{k-1}} \right]} \quad (\text{Ec. 6.6.3-2})$$

Entorno Non Choquet:

$$Q = C \cdot A \cdot \sqrt{2 \cdot \rho \cdot P \cdot \left( \frac{k}{k-1} \right) \cdot \left[ \left( \frac{P_A}{P} \right)^{\frac{2}{k}} - \left( \frac{P_A}{P} \right)^{\frac{k+1}{k}} \right]} \quad (\text{Ec. 6.6.3-3})$$



$Q$  = flujo másico ( $kg \cdot s^{-1}$ )

$C$  = coeficiente de descarga, adimensional, =0.72

$A$  = area agujero descarga ( $m^2$ )

$k = c_p / c_v$  del gas

$c_p$  = calor específico del gas a P cte.

$c_v$  = calor específico del gas a V cte.

$\rho$  = densidad del gas real a P y T ( $kg / m^3$ )

$P$  = presión absoluta aguas arriba (Pa)

$P_A$  = presión absoluta ambiente (Pa)

$M$  = masa molecular del gas ( $kg \cdot mol^{-1}$ )

$R$  = constante de la ley universal de los gases =  $8314 J \cdot mol^{-1} \cdot K^{-1}$

$T$  = Temperatura del gas aguas arriba (K)

Gas ideal (Ec. 6.6.3-4)

$$C_p = C_v + R$$

$$C_p = 35.552 KJ \cdot kmol^{-1} \cdot K^{-1} \quad (Ec. 6.6.3-5)$$

$$k = \frac{C_p}{C_v} = \frac{35.552}{27.238} = 1.3052 \quad (Ec. 6.6.3-6)$$

$$\rho = \frac{P \cdot M}{R \cdot T} = \frac{1.83 \cdot 10^5 \cdot 16 \cdot 10^{-3}}{8.314 \cdot 298} = 1.1818 kg \cdot m^{-3} \quad (Ec. 6.6.3-7)$$

$$\left( \frac{P}{1} \right) < \left( \frac{1.3052 + 1}{2} \right)^{\left( \frac{1.3052}{0.3052} \right)} \rightarrow P(\text{choquet-non\_choquet}) = 183000 Pa \quad (Ec. 6.6.3-8)$$

Según nos encontremos en régimen subsónico o sónico utilizaremos las ecuaciones para choquet o non choquet (Ec. 6.6.3-2) y (Ec. 6.6.3-3) respectivamente donde la presión en la que se igualan las condiciones de ambas ecuaciones o dicho de otra forma nos encontramos en régimen de Mach uno nos viene dado por la (Ec. 6.6.3-1).

En la (Ec. 6.6.3-8) observamos como la presión de Mach igual a uno es 183000 Pa o aproximadamente 1.83 bar absolutos, paralelamente buscamos los valores de densidad,



constante termodinámica y capacidad calorífica a presión constante con las ecuaciones (Ec. 6.6.3-4) a (Ec. 6.6.3-7)

Una vez nos definimos bajo régimen de Choquet utilizaremos la ecuación (Ec. 6.6.3-2) y de la cual se desprenden los siguientes cálculos:

contexto choquet

$$Q = 1 \cdot \pi \cdot (0.001)^2 \cdot \sqrt{1.3052 \cdot 2.9393 \cdot 183000 \cdot \left[ \left( \frac{2}{1.3052+1} \right)^{\left( \frac{1.3052+1}{1.3052-1} \right)} \right]} = 9.7623456 \cdot 10^{-4} \text{ kg} \cdot \text{s}^{-1}$$

$$\frac{9.7623456 \cdot 10^{-4} \frac{\text{kg}}{\text{s}}}{0.6679 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}} = 1.46164 \cdot 10^{-3} \frac{\text{m}^3}{\text{s}} \rightarrow \frac{1.46164 \cdot 10^{-3} \frac{\text{m}^3}{\text{s}}}{\pi \cdot (0.001)^2 \text{ m}^2} = 465.256 \frac{\text{m}}{\text{s}} \text{ velocidad sónica}$$

Esta velocidad es la velocidad sónica que adopta el gas al emanar por el orificio, pero sería bueno compararlo con el cálculo del número de Mach, como sigue a continuación:

comprobacion Mach

$$c = \sqrt{\frac{\gamma RT}{M}} = \sqrt{\frac{1.3052 \cdot 8313 \cdot 298}{16}} = 449.53 \text{ ms}^{-1} \quad (\text{Ec. 6.6.3-9})$$

$$M = \frac{V}{c} = \frac{465.256}{449.53} = 1.03498 \text{ Mach} \quad (\text{Ec. 6.6.3-10})$$

Por tanto comprobamos satisfactoriamente que estamos en condiciones Choquet y que el flujo es sónico como demuestra la (Ec. 6.6.3-10).





#### 6.6.4 Parámetros de simulación

En esta simulación cabe comentar que se han realizado múltiples pruebas de ensayo por el método de prueba y error, ya que la convergencia nunca fue inmediata ni el resultado satisfactorio. Ajustando las condiciones de operación como se han enunciado previamente con la ventilación y la velocidad sónica finalmente se consiguió simular satisfactoriamente el dardo de emisión. En la última simulación y correcta a su vez, se emplearon 3.5 horas y cerca de 450 iteraciones, aun siendo muchos los intentos previos infructuosos que nos llevaron finalmente a la optima obtención del resultado aquí mostrado.

#### 6.6.5 Obtención de resultados

El análisis de los resultados siguiente da como conclusión una simulación satisfactoria. Veamos porque, en primer lugar el dardo de gas que genera la atmósfera explosiva tiene dirección horizontal y sentido negativo en el eje de las X tal y como se definió en las condiciones de operación. El dardo de gas tiene forma de ojiva típica de este tipo de emanaciones. Lo que mas nos sorprende es su magnitud, es decir, el alcance que tiene y lo largo que este dardo puede llegar a ser. Dado que Fluent no nos permite calcular este alcance debemos escalar sobre el lado largo de la estancia (10 metros) para obtener este dardo. Su magnitud pues es de 0.57 metros. Un estudio comparativo con los cálculos y pictogramas propuestos por el CETIB (como se vera posteriormente) da como resultado que efectivamente debemos obtener un dardo de entre aproximadamente 0.5 metros y 0.75 metros, lo que corrobora nuestra simulación. Además, si realizamos un corte en el centro de esta atmósfera como se muestra en la Fig. 6.6.5-3 observamos que entre el punto de emisión y el límite superior de inflamabilidad, efectivamente no hay atmósfera explosiva puesto que la concentración de aire es insuficiente para deflagrar esta.

El efecto de la ventilación es apenas observable, pero existe. Este efecto lo podremos observar con más detalle en el siguiente caso donde la emisión y la ventilación discurren a contracorriente y este fenómeno tiene implicaciones en el área inflamable.



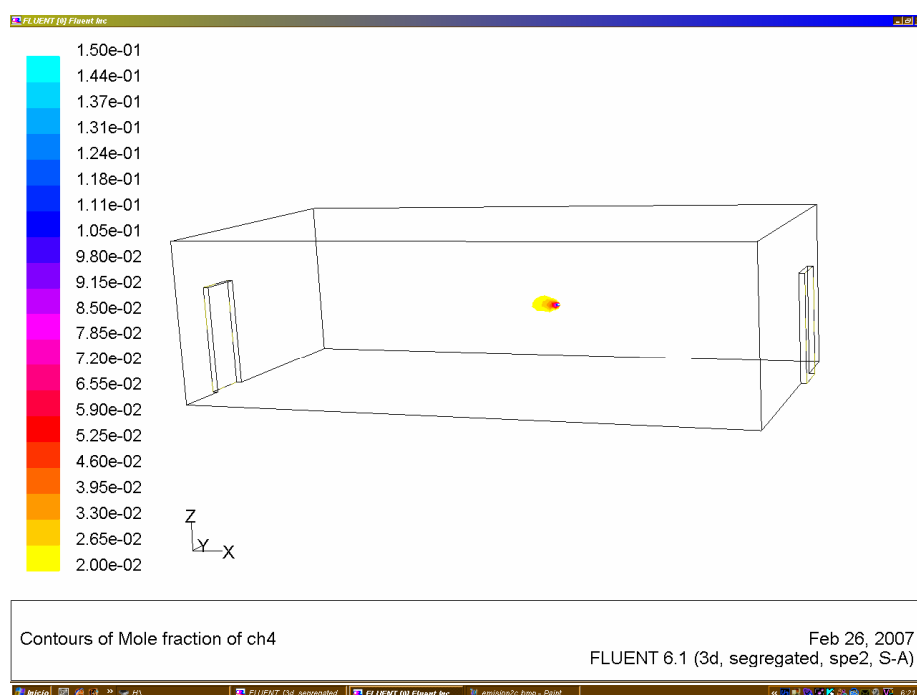


Fig. 6.6.5-1. Atmósfera inflamable generada por el escape de 2mm de diámetro

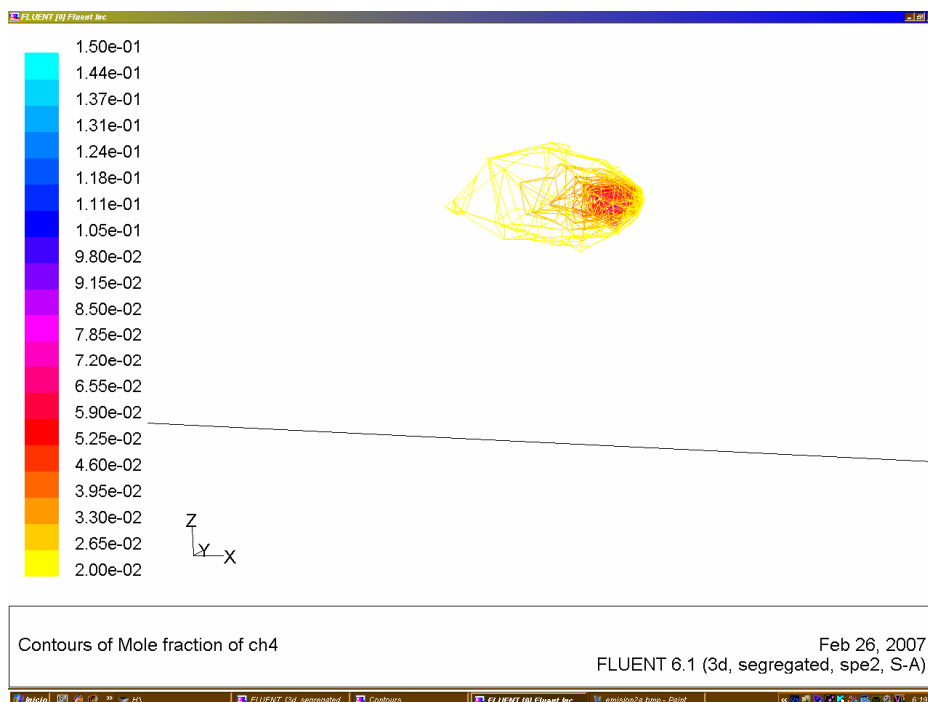


Fig. 6.6.5-2. Ampliación de la atmósfera generada por el escape



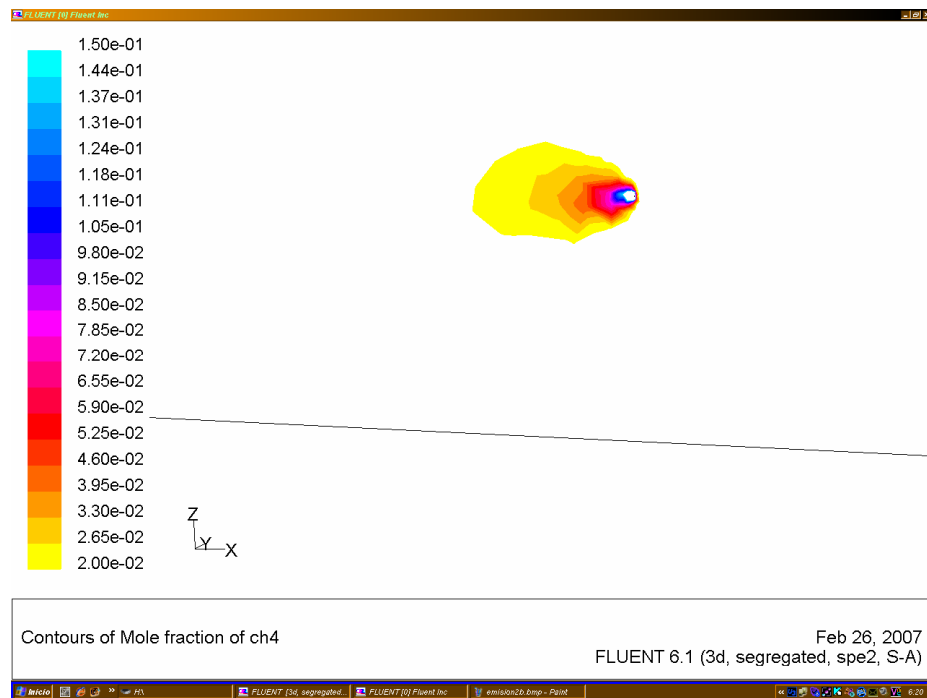


Fig. 6.6.5-3. Sección ampliada de la atmósfera inflamable

## 6.6.6 Conclusión

La simulación de este tipo de casos es muy interesante en escenarios donde tengamos geometrías de válvulas o entornos más complejos en los que puedan existir puntos de ignición. Como comentábamos, la ventilación juega un papel importante por que en función de esta la atmósfera puede propagarse mas, diluirse, o bien expandirse en altura si los flujos son contrapuestos como veremos en el siguiente caso. Este tipo de simulaciones requieren conocimientos de fenómenos de transporte, concretamente de fenómenos de materia y cantidad de movimiento en entornos isotérmicos y de energía cuando la temperatura ambiente es diferente de la del fluido en su punto de emisión. Como comentario a esta ultima afirmación se puede observar en la fig 6.6.5-3 como existe un perfil de concentraciones (varios colores) desde el punto de emisión hasta el horizonte del alcance explosivo. Este gradiente de concentraciones es debido al fenómeno de difusión donde el gas originalmente concentrado diluye su concentración en el aire. El gradiente aumenta en dirección al origen de la fuga lo que significa que la difusión es anisótropa, es decir, en todas las direcciones, pero más favorecida en unas que en otras, en este caso esta mas favorecida en la dirección del flujo de emisión que coincide con el de ventilación.



## 6.7 Escape de gas natural (emisión 5 mm)

### 6.7.1 Definición de la geometría

En este caso la geometría es prácticamente igual a la del caso anterior (emisión de metano 2 mm) Por lo que en este apartado comentaremos poco al respecto invitando al lector a revisar dicho punto explicativo.

### 6.7.2 Definición de las condiciones de operación

En las condiciones de operación de este caso cabe mencionar que el flujo emanado por el poro, alcanza un valor de Mach de 1.031, el resto de condiciones son idénticas a las del caso anterior salvo una muy importante, y es que el flujo de la ventilación entre las puertas del recinto es en dirección X, lo que implica que el flujo del dardo de gas y el de la ventilación son a contracorriente, lo que nos ofrecerá un resultado grafico diferente al caso anterior como se comentara en el apartado de obtención de resultados.

### 6.7.3 Caracterización de la fuente de escape

Para caracterizar la fuente de escape debemos atender a las siguientes ecuaciones:

Condición Choquet o non choquet si cumple la inecuación siguiente:

$$\left( \frac{P_{source}}{P_{amb}} \right) < \left( \frac{k+1}{2} \right)^{\frac{k}{k-1}} \quad (\text{Ec. 6.7.3-1})$$

Entorno choquet:

$$Q = C \cdot A \cdot \sqrt{k \cdot \rho \cdot P \cdot \left[ \left( \frac{2}{k+1} \right)^{\frac{k+1}{k-1}} \right]} \quad (\text{Ec. 6.7.3-2})$$

Entorno Non Choquet:

$$Q = C \cdot A \cdot \sqrt{2 \cdot \rho \cdot P \cdot \left( \frac{k}{k-1} \right) \cdot \left[ \left( \frac{P_A}{P} \right)^{\frac{2}{k}} - \left( \frac{P_A}{P} \right)^{\frac{k+1}{k}} \right]} \quad (\text{Ec. 6.7.3-3})$$



$Q$  = flujo másico ( $kg \cdot s^{-1}$ )

$C$  = coeficiente de descarga, adimensional, =0.72

$A$  = area agujero descarga ( $m^2$ )

$k = c_p / c_v$  del gas

$c_p$  = calor específico del gas a P cte.

$c_v$  = calor específico del gas a V cte.

$\rho$  = densidad del gas real a P y T ( $kg / m^3$ )

$P$  = presión absoluta aguas arriba (Pa)

$P_A$  = presión absoluta ambiente (Pa)

$M$  = masa molecular del gas ( $kg \cdot mol^{-1}$ )

$R$  = constante de la ley universal de los gases =  $8314 J \cdot mol^{-1} \cdot K^{-1}$

$T$  = Temperatura del gas aguas arriba (K)

Gas ideal

$$C_p = C_v + R$$

(Ec. 6.7.3-4)

$$C_p = 35.552 KJ \cdot kmol^{-1} \cdot K^{-1}$$

(Ec. 6.7.3-5)

$$k = \frac{C_p}{C_v} = \frac{35.552}{27.238} = 1.3052$$

(Ec. 6.7.3-6)

$$\rho = \frac{P \cdot M}{R \cdot T} = \frac{1.83 \cdot 10^5 \cdot 16 \cdot 10^{-3}}{8.314 \cdot 298} = 1.1818 kg \cdot m^{-3}$$

(Ec. 6.7.3-7)

$$\left( \frac{P}{1} \right) < \left( \frac{1.3052 + 1}{2} \right)^{\left( \frac{1.3052}{0.3052} \right)} \rightarrow P(\text{choquet-non\_choquet}) = 183000 Pa \quad (\text{Ec. 6.7.3-8})$$

Según nos encontremos en régimen subsónico o sónico utilizaremos las ecuaciones para choquet o non choquet (Ec. 6.7.3-2) y (Ec. 6.7.3-3) respectivamente donde la presión en la que se igualan las condiciones de ambas ecuaciones o dicho de otra forma nos encontramos en régimen de Mach uno nos viene dado por la (Ec. 6.7.3-1).

En la (Ec. 6.7.3-8) observamos como la presión de Mach igual a uno es 183000 Pa o aproximadamente 1.83 bar absolutos, paralelamente buscamos los valores de densidad,



constante termodinámica y capacidad calorífica a presión constante con las ecuaciones (Ec. 6.7.3-4) a (Ec. 6.7.3-7)

Una vez nos definimos bajo régimen de Choquet utilizaremos la ecuación (Ec. 6.7.3-2) y de la cual se desprenden los siguientes cálculos:

contexto choquet

$$Q = 1 \cdot \pi \cdot (0.0025)^2 \cdot \sqrt{1.3052 \cdot 2.9393 \cdot 183000 \cdot \left[ \left( \frac{2}{1.3052 + 1} \right)^{\left( \frac{1.3052 + 1}{1.3052 - 1} \right)} \right]} = 6.10979 \cdot 10^{-3} \text{ kg} \cdot \text{s}^{-1}$$

$$\frac{6.10979 \cdot 10^{-3} \frac{\text{kg}}{\text{s}}}{0.6679 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}} = 9.14776 \cdot 10^{-3} \frac{\text{m}^3}{\text{s}} \rightarrow \frac{9.14776 \cdot 10^{-3} \frac{\text{m}^3}{\text{s}}}{\pi \cdot (0.0025)^2 \text{ m}^2} = 465.89 \frac{\text{m}}{\text{s}} \text{ velocidad sónica}$$

Esta velocidad es la velocidad sónica que adopta el gas al emanar por el orificio, pero sería bueno compararlo con el cálculo del número de Mach, como sigue a continuación:

comprobacion Mach

$$c = \sqrt{\frac{\gamma RT}{M}} = \sqrt{\frac{1.3052 \cdot 8313 \cdot 298}{16}} = 449.53 \text{ ms}^{-1} \quad (\text{Ec. 6.7.3-9})$$

$$M = \frac{V}{c} = \frac{465.89}{449.53} = 1.036 \text{ Mach} \quad (\text{Ec. 6.7.3-10})$$

Por tanto comprobamos satisfactoriamente que estamos en condiciones Choquet y que el flujo es sónico como demuestra la (Ec. 6.7.3-10).



#### 6.7.4 Parámetros de simulación

Los parámetros de simulación son muy similares a los del caso anterior, pero la heurística acumulada en el anterior caso ha servido para reducir el ensayo de prueba y error y ajuste del simulador, ya que en el caso anterior aprendí como tratar este tipo de casos. Por tanto la aplicación a este ha sido más ágil y certera.

#### 6.7.5 Obtención de resultados

En el apartado de análisis de resultados se debe comentar que al igual que en el caso anterior la simulación nos brinda un resultado esperado, donde el dardo de gas tiene un alcance de 0.75 metros, resultado muy aceptable según cálculos del CETIB, ya referidos anteriormente. Hay que hacer mención al efecto de la ventilación en contracorriente, la cual se opone al flujo de la emisión y esto se materializa a modo de pantalla, por lo que el dardo de gas ya no tiene forma de ojiva como en el caso anterior, sino que esta se ve claramente deformada como se muestra en las figuras siguientes.

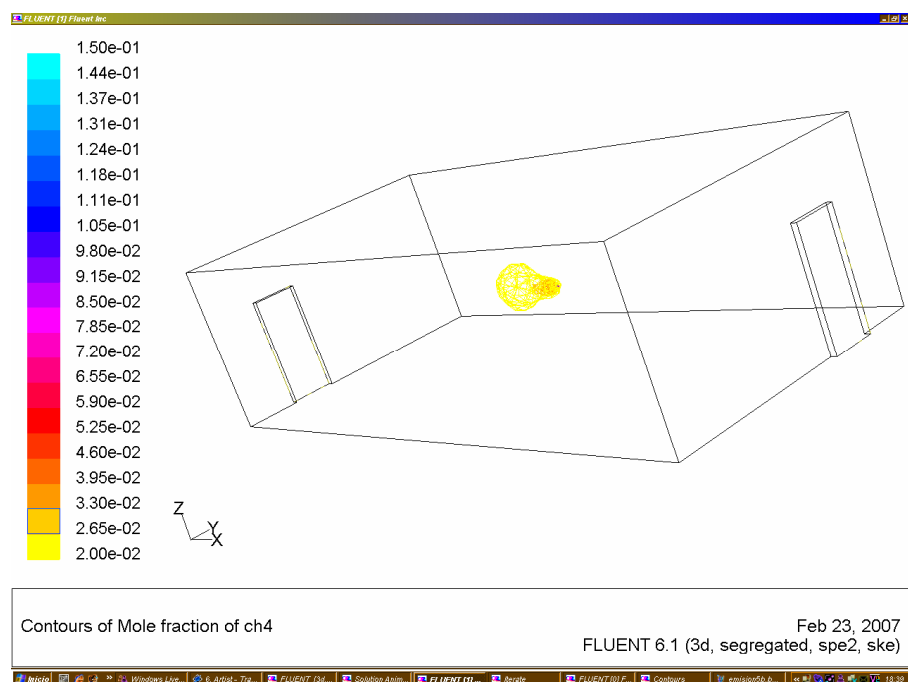


Fig. 6.7.5-1. Atmósfera inflamable generada por el escape de 5 mm de diámetro



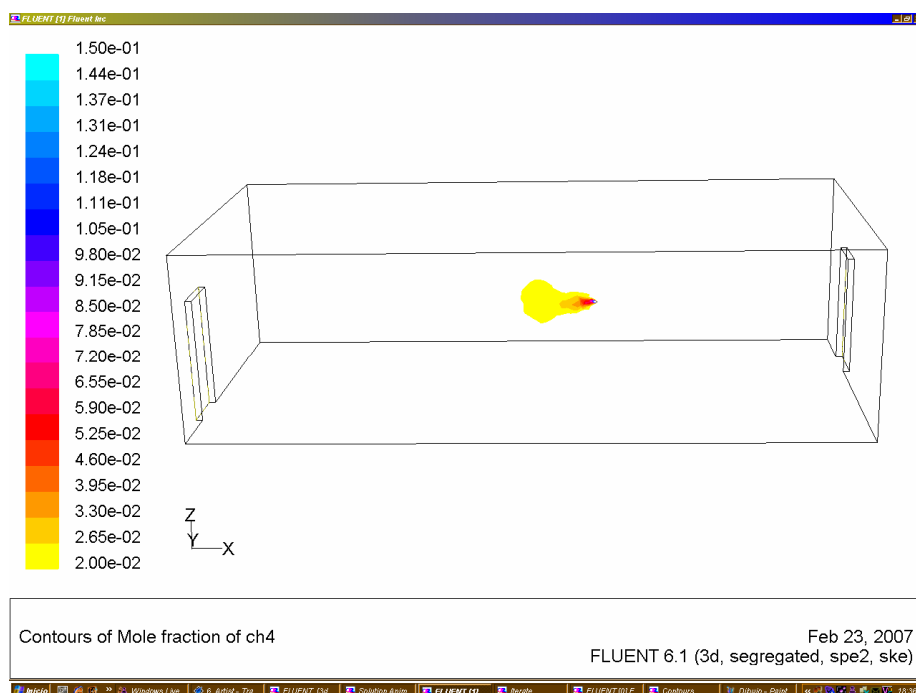


Fig. 6.7.5-2. Sección de la atmósfera inflamable

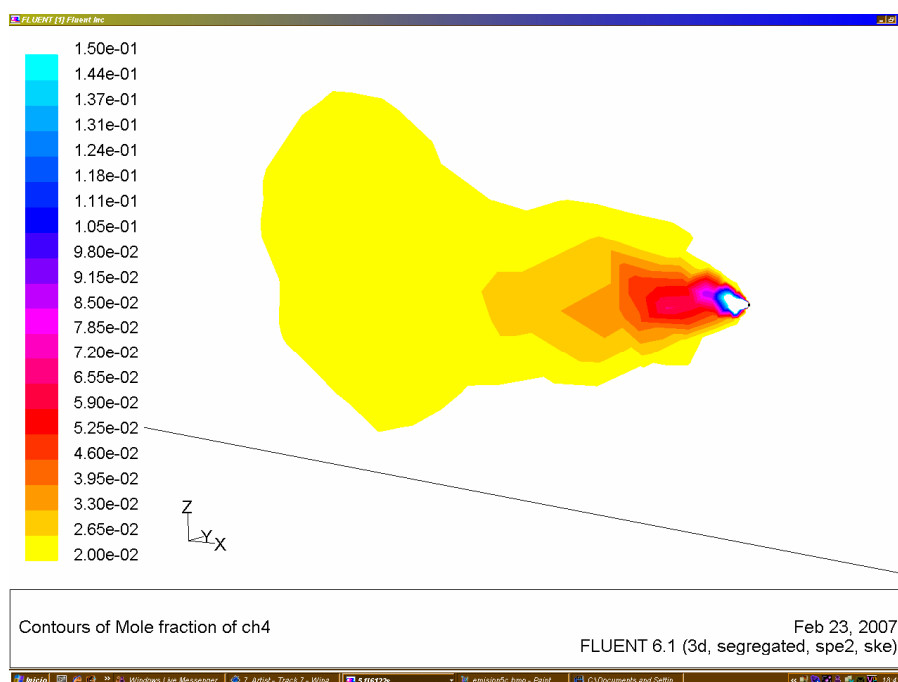


Fig. 6.7.5-3. Ampliación de la sección de la atmósfera inflamable





### 6.7.6 Conclusión

Las conclusiones que se pueden desprender de este caso son prácticamente las mismas que en el caso anterior excepto a las inherentes del propio caso. En este contexto ubicamos el tamaño del poro, que en el caso anterior era de 2 mm y en este de 5 mm. Dónde se observa como a mayor tamaño del poro mayor atmósfera explosiva generada tendremos, pero cabe destacar que la velocidad de salida no varía ni por tanto el número de Mach (véanse puntos 7.6.3 y 7.7.3) que permanecen constantes, ya que estos van a depender de la presión como parámetro principal. El alcance inflamable al ser mayor en este caso a su vez es más susceptible de interactuar con una ventilación a contracorriente, lo que genera en el frente del dardo una zona de pantalla y no tiene forma penetrante. Al igual que en el caso anterior existe un gradiente de concentraciones por el mismo efecto de difusión comentado en el punto 7.6.6.

## 6.8 Charco tolueno

### 6.8.1 Definición de la geometría

La geometría de esta simulación es la de un charco o vertido de dimensiones 1 X 3 metros con su eje longitudinal paralelo al de la estancia estándar de 3 X 5 X 10 metros, pero no centrado en el origen de la base.

### 6.8.2 Definición de las condiciones de operación

En este caso el derrame situado en la base de la estancia emana vapores de Tolueno, que son arrastrados o parcialmente desplazados por una corriente de aire fresco (concentración nula de Tolueno). La corriente de aire discurre a lo largo del eje + X desde la puerta de entrada hasta la puerta de salida. Como veremos, el Tolueno al ser más pesado que el aire estratifica en las cotas bajas de la estancia, por lo que su atmósfera inflamable queda bien determinada y definida.

### 6.8.3 Caracterización de la fuente de escape

La tasa de emisión de vapores desde el charco o derrame ha sido calculada acorde con el siguiente procedimiento propuesto por Kawamura y Mackay [6]:



$$D_m = D_{H_2O} \cdot \sqrt{\frac{M_{w_{H_2O}}}{M_{w_m}}} (m^2 s^{-1}) \quad (\text{Ec. 6.8.3-1})$$

$D_m$  = difusividad molecular en aire, en  $(m^2 s^{-1})$

$D_{H_2O}$  = difusividad molecular del agua  $(2.4 \cdot 10^{-5} m^2 s^{-1})$

$M_{w_{H_2O}}$  = peso molecular del agua  $(18 kg \cdot kmol^{-1})$

$M_{w_m}$  = peso molecular del compuesto  $(kg \cdot kmol^{-1})$

$$S_c = \frac{\nu}{D_m} \quad (\text{Ec. 6.8.3-2})$$

$S_c$  = Número laminar de Schmidt

$\nu$  = viscosidad cinemática del aire  $(m^2 s^{-1})$

$D_m$  = Difusividad molecular del compuesto en aire  $(m^2 s^{-1})$

$$K_m = 0.0048 \cdot U^{\frac{7}{9}} \cdot Z^{\frac{-1}{9}} \cdot S_c^{\frac{-2}{3}} (m \cdot s^{-1}) \quad (\text{Ec. 6.8.3-3})$$

$K_m$  = coeficiente de transferencia de masa del compuesto  $(m \cdot s^{-1})$

$U$  = velocidad del viento  $(m \cdot s^{-1})$

$Z$  = Longitud característica del charco en la dirección del viento

$S_c$  = Número laminar de Schmidt

$$E = A \cdot K_M \cdot \left( \frac{M_w \cdot P_v}{R \cdot T} \right) (kg \cdot s^{-1}) \quad (\text{Ec. 6.8.3-4})$$

$E$  = tasa de evaporación  $(kg \cdot s^{-1})$

$A$  = área del charco en evaporación  $(m^2)$

$K_M$  = coeficiente de transferencia de masa  $(m \cdot s^{-1})$

$M_w$  = peso molecular del compuesto  $(kg \cdot kmol^{-1})$

$P_v$  = presión de vapor  $(Pa)$

$R$  = constante de los gases  $(8314 J \cdot kmol^{-1} \cdot K^{-1})$

$T$  = temperatura ambiente  $(K)$



Realizamos los cálculos descritos en las ecuaciones 8.1 a 8.4 en el mismo orden en que se presentan y obtenemos:

$$D_M = 2.4 \cdot 10^{-5} \cdot \sqrt{\frac{18}{92.1}} = 1.06 \cdot 10^{-5} m \cdot s^{-1}$$

$$S_c = \frac{1.5 \cdot 10^{-5}}{1.06 \cdot 10^{-5}} = 1.415$$

$$K_M = 0.0048 \cdot 5^{\frac{7}{9}} \cdot 1^{\frac{-1}{9}} \cdot 1.415^{\frac{-2}{3}} = 1.331 \cdot 10^{-2} (m \cdot s^{-1})$$

$$E = 3 \cdot 1.331 \cdot 10^{-2} \cdot \left( \frac{92.1 \cdot 2900}{8314 \cdot 293} \right) = 4.379 \cdot 10^{-3} kg \cdot s^{-1}$$

$$\frac{0.004379 \frac{kg}{s}}{3.91 \frac{kg}{m^3}} = 1.1199 \cdot 10^{-3} \frac{m^3}{s} \rightarrow \frac{1.1199 \cdot 10^{-3} \frac{m^3}{s}}{3m^2} = 3.7331 \cdot 10^{-4} \frac{m}{s}$$

Como podemos observar el número de Schmidt nos da la relación entre la viscosidad cinemática y la difusividad, lo que nos da una idea del momento de difusividad de la especie. Concretamente al ser mayor que la unidad nos aporta información acerca del movimiento convectivo predominante sobre el movimiento difusional. Cabe esperar una atmósfera que se rige por los parámetros de ventilación convectiva antes que los propios efectos difusionales de la especie en el volumen de la estancia.

La temperatura y presión de la estancia son de 293 K y 1 atmósfera



#### 6.8.4 Parámetros de simulación

Para realizar esta simulación se han lanzado varios intentos infructuosos debidos principalmente a la dirección y magnitud de la corriente de aire, que finalmente encontramos idónea en 2 m/s. La simulación definitiva ha conllevado aproximadamente 4 horas de simulación y cerca de 450 iteraciones.

#### 6.8.5 Obtención de resultados

Seguidamente presentamos los resultados obtenidos en esta simulación, donde se puede apreciar claramente como el Tolueno estratifica en las cotas bajas debido a su densidad. La forma adoptada por la atmósfera inflamable no es caprichosa sino que corresponde al arrastre por el flujo de aire que circula entre las dos puertas a lo largo del eje +X. En su corte longitudinal se aprecia como la atmósfera inflamable queda comprendida entre los límites inferior y superior de inflamabilidad de valores 1% y 6,8% respectivamente.

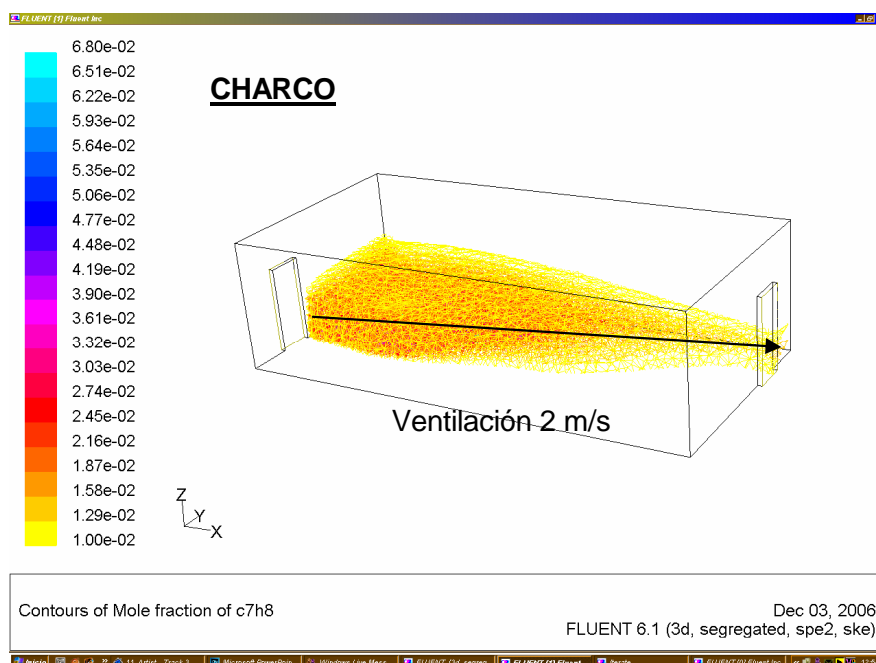


Fig. 6.8.5-1. Atmósfera inflamable generada por la evaporación de un derrame



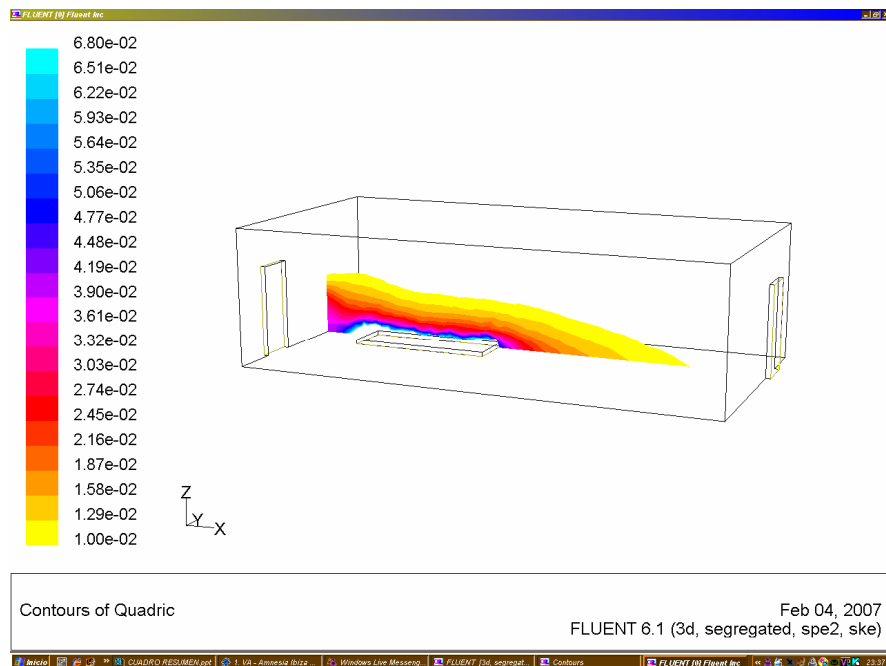


Fig. 6.8.5-2. Detalle del corte longitudinal de la atmósfera inflamable

### 6.8.6 Conclusión

Podemos concluir que esta simulación nos ofrece un resultado en parte esperado. Como es bien sabido este tipo de atmósferas generadas por los derrames o charcos son peligrosas pues discurren por las cotas bajas del suelo, hasta encontrar un punto de ignición o destello a partir del cual se inflaman. Esto supone una clasificación de zona acorde con dos parámetros muy relevantes: la frecuencia del fenómeno y el grado de renovación de la ventilación. Por lo general el alcance de esta atmósfera sería el de toda la estancia, pero gracias a la simulación observamos que realmente hay zonas mas expuestas que otras.



## 6.9 Charco tolueno con campana

### 6.9.1 Definición de la geometría

Este es el caso anterior pero tratado de forma ampliada. Ahora incorporamos una campana de extracción que potenciará las renovaciones de aire. La estancia es la que hemos utilizado en todos los casos, el derrame el mismo que en el caso anterior y ahora la campana es del tipo cocina, situada sobre 1.5 metros de altura sobre el derrame. Tiene un área de extracción igual a la del derrame para estrecharse a medida que esta gana altura.

### 6.9.2 Definición de las condiciones de operación

Las condiciones de operación de este caso son muy similares a las del anterior solo que como ya comentábamos incorpora un nuevo elemento de renovación. La temperatura de la estancia es de 293 K y la presión la atmosférica. La renovación por convección de las puertas se produce a lo largo del eje +X con una velocidad de 2 m/s. La campana extrae a una velocidad de 0.0833 m/s. Esta velocidad es inferior a la de las campanas extractoras de los casos 6.4 y 6.5. Esto es debido a que la superficie de ataque es superior pero en los tres casos se ha calculado sobre un factor de 0.3 renovaciones/minuto. Este valor de renovaciones lo podemos considerar coherente atendiendo a los parámetros de la norma ATEX.

### 6.9.3 Caracterización de la fuente de escape

Tal y como hemos procedido en el caso anterior calcularemos la tasa de emisión mediante Kawamura y Mackay [6].

$$D_m = D_{H_2O} \cdot \sqrt{\frac{M_{w_{H_2O}}}{M_{w_m}}} (m^2 s^{-1}) \quad (\text{Ec. 6.9.3-1})$$

$D_m$  = difusividad molecular en aire, en ( $m^2 s^{-1}$ )

$D_{H_2O}$  = difusividad molecular del agua ( $2.4 \cdot 10^{-5} m^2 s^{-1}$ )

$M_{w_{H_2O}}$  = peso molecular del agua ( $18 kg \cdot kmol^{-1}$ )

$M_{w_m}$  = peso molecular del compuesto ( $kg \cdot kmol^{-1}$ )

$$S_c = \frac{V}{D_m} \quad (\text{Ec. 6.9.3-2})$$



$S_c$  = Número laminar de Schmidt

$\nu$  = viscosidad cinemática del aire ( $m^2 s^{-1}$ )

$D_m$  = Difusividad molecular del compuesto en aire ( $m^2 s^{-1}$ )

$$K_m = 0.0048 \cdot U^{\frac{7}{9}} \cdot Z^{\frac{-1}{9}} \cdot S_c^{\frac{-2}{3}} (m \cdot s^{-1}) \quad (\text{Ec. 6.9.3-3})$$

$K_m$  = coeficiente de transferencia de masa del compuesto ( $m \cdot s^{-1}$ )

$U$  = velocidad del viento ( $m \cdot s^{-1}$ )

$Z$  = Longitud característica del charco en la dirección del viento

$S_c$  = Número laminar de Schmidt

$$E = A \cdot K_M \cdot \left( \frac{M_w \cdot P_v}{R \cdot T} \right) (kg \cdot s^{-1}) \quad (\text{Ec. 6.9.3-4})$$

$E$  = tasa de evaporación ( $kg \cdot s^{-1}$ )

$A$  = área del charco en evaporación ( $m^2$ )

$K_M$  = coeficiente de transferencia de masa ( $m \cdot s^{-1}$ )

$M_w$  = peso molecular del compuesto ( $kg \cdot kmol^{-1}$ )

$P_v$  = presión de vapor ( $Pa$ )

$R$  = constante de los gases ( $8314 J \cdot kmol^{-1} \cdot K^{-1}$ )

$T$  = temperatura ambiente ( $K$ )

Realizamos los cálculos descritos en las ecuaciones 6.9.3-1 a 6.9.3-4 en el mismo orden en que se presentan y obtenemos:

$$D_M = 2.4 \cdot 10^{-5} \cdot \sqrt{\frac{18}{92.1}} = 1.06 \cdot 10^{-5} m \cdot s^{-1}$$

$$S_c = \frac{1.5 \cdot 10^{-5}}{1.06 \cdot 10^{-5}} = 1.415$$



$$K_M = 0.0048 \cdot 5^{\frac{7}{9}} \cdot 1^{\frac{-1}{9}} \cdot 1.415^{\frac{-2}{3}} = 1.331 \cdot 10^{-2} (m \cdot s^{-1})$$

$$E = 3 \cdot 1.331 \cdot 10^{-2} \cdot \left( \frac{92.1 \cdot 2900}{8314 \cdot 293} \right) = 4.379 \cdot 10^{-3} kg \cdot s^{-1}$$

$$\frac{0.004379 \frac{kg}{s}}{3.91 \frac{kg}{m^3}} = 1.1199 \cdot 10^{-3} \frac{m^3}{s} \rightarrow \frac{1.1199 \cdot 10^{-3} \frac{m^3}{s}}{3m^2} = 3.7331 \cdot 10^{-4} \frac{m}{s}$$

De forma análoga a los casos 6.4 y 6.5 calculamos ahora la velocidad de extracción de la campana en función de las renovaciones:

$$\frac{A \cdot \vec{u}}{V} = \frac{(m^2) \left( \frac{m}{s} \right)}{(m^3)} = s^{-1} \quad (\text{Ec. 6.9.3-5})$$

$$0.3 \frac{m^3}{\text{min} \cdot m^2} \rightarrow \left\{ \begin{array}{l} 10 \cdot 3 \cdot 5 = 150 m^3 \\ 10 \cdot 5 = 50 m^2 \end{array} \right\} \rightarrow 0.3 \frac{m^3}{\text{min} \cdot m^2} = \lambda \text{min}^{-1} \cdot \frac{150 m^3}{50 m^2}; \quad (\text{Ec. 6.9.3-6})$$

$$\lambda = 0.3 \frac{m^3}{\text{min} \cdot m^2} \cdot \frac{50 m^2}{150 m^3} = 0.1 \text{min}^{-1} \quad (\text{Ec. 6.9.3-7})$$

$$\lambda = 0.1 \text{min}^{-1} \cdot \frac{1 \text{min}}{60s} = 1.666 \cdot 10^{-3} s^{-1} \quad (\text{Ec. 6.9.3-8})$$

$$\vec{u} = \frac{\lambda \cdot V}{A} = \frac{1.666 \cdot 10^{-3} s^{-1} \cdot 150 m^3}{3m^2} = 0.0833 \frac{m}{s} \quad (\text{Ec. 6.9.3-9})$$





#### 6.9.4 Parámetros de simulación

En esta simulación han sido necesarias invertir 4 horas con aproximadamente 450 iteraciones.

#### 6.9.5 Obtención de resultados

Los resultados obtenidos en esta simulación son dignos de comentar sucintamente. En primer lugar hay que destacar que en el área inmediatamente por encima del charco se produce una disminución de la atmósfera inflamable por efecto directo de la campana. En segundo lugar hay que comentar que, todo el vapor de Tolueno emanado desde el derrame que no ha sido absorbido por la campana se ve arrastrado a merced de la corriente convectiva de aire que circula entre las puertas. Esta corriente es la responsable de que la atmósfera inflamable adopte una forma caprichosa pero consecuente reológicamente hablando.

Si realizamos un corte longitudinal como hemos realizado en el caso anterior y lo comparamos con este vemos claramente como la campana disminuye dicha atmósfera. Esto es por que al succionar el componente inflamable se realiza una mezcla con aire fresco y hace descender la concentración por debajo del límite inferior de inflamabilidad. Contrariamente a las otras campanas que absorbían directamente la atmósfera inflamable, nos damos cuenta de que el diseño de la campana es fundamental para cada caso, pues tal y como muestra el resultado de esta simulación podemos estar frente a un fenómeno de agitación. Este fenómeno de agitación disminuye la atmósfera inflamable allí donde no queremos que esta se produzca, pero no asegura que por el diseño de la campana se agite el componente en zonas indeseadas creando una nueva situación de riesgo. De hecho esto apunta a la conclusión final de este proyecto, donde se recoge que la simulación mediante CFD es poco útil para casos sencillos que pueden ser resueltos mediante pictogramas o formulas empíricas, pero si de gran utilidad para casos complejos como el que aquí se presenta.

Así pues, la simulación mediante CFD es aconsejable para situaciones en las que la geometría del entorno, la especie, o las condiciones de contorno hacen difícil su tratamiento mediante métodos convencionales. La simulación por CFD ofrece la posibilidad de alterar, una vez mallada la geometría, los parámetros para estudiar por ejemplo la mínima renovación de un recinto para evitar la acumulación de atmósferas explosivas. Veamos pues los resultados de este interesante caso:



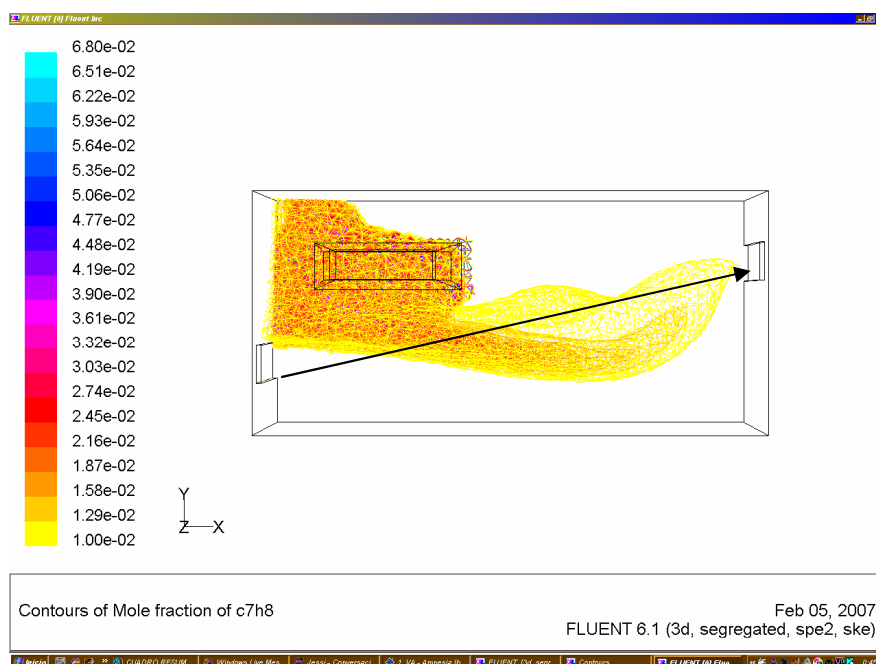


Fig. 6.9.5-1. Arrastre de la corriente convectiva

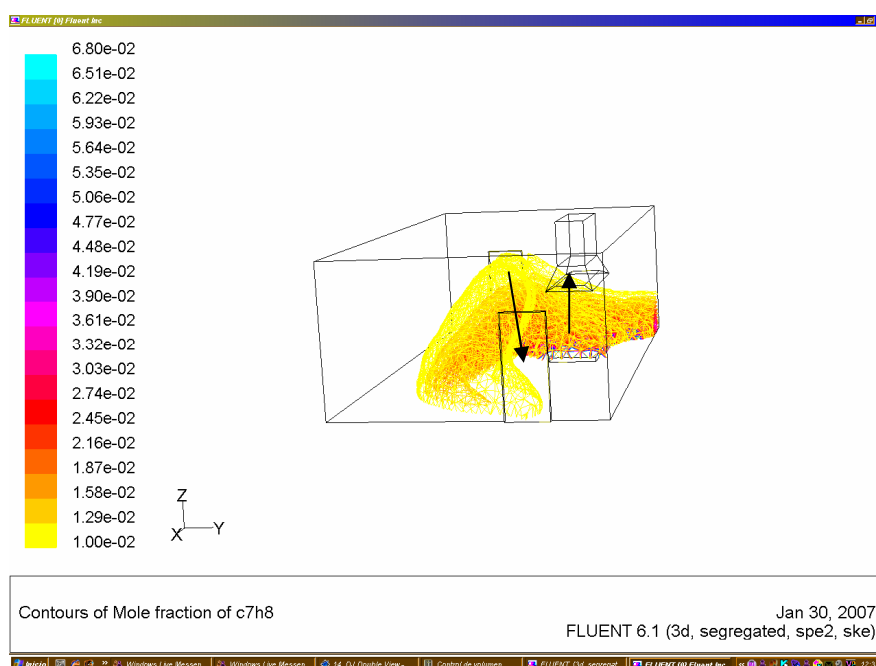


Fig. 6.9.5-2. Disminución de la atmósfera inflamable encima del derrame



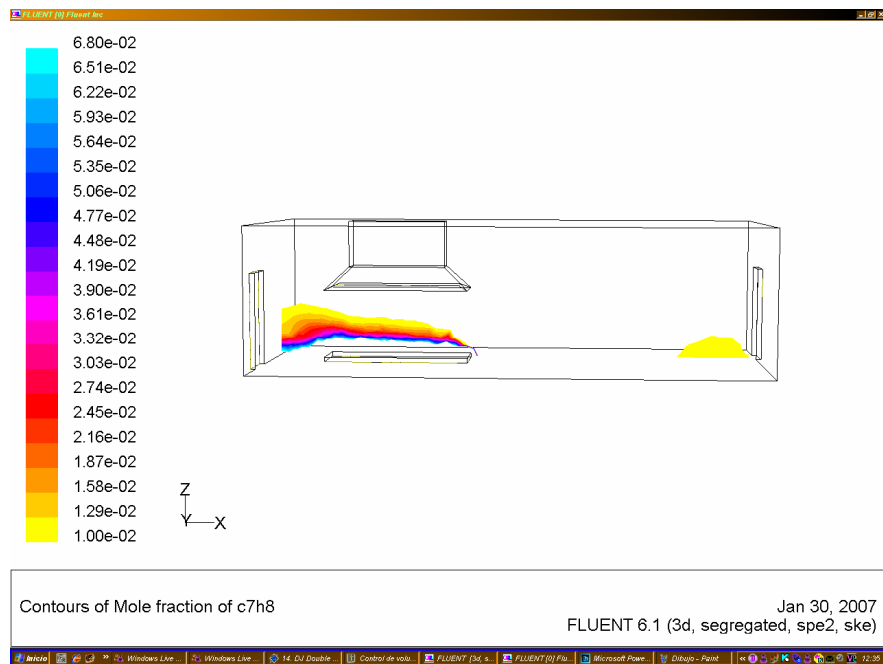


Fig. 6.9.5-3. Sección longitudinal donde se aprecian los límites de inflamabilidad

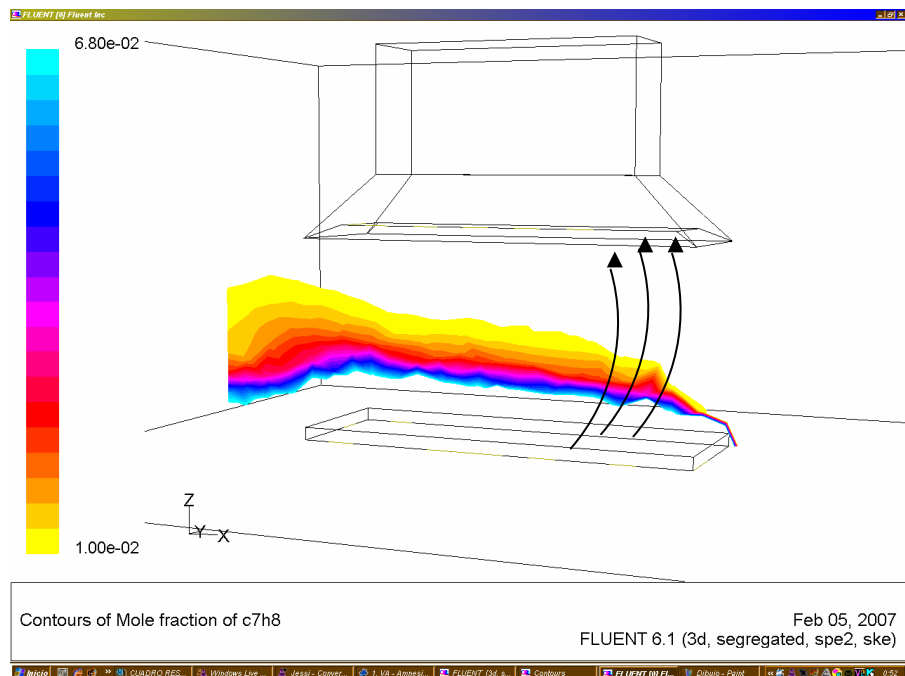


Fig. 6.9.5-4. Límites superior (azul) e inferior (amarillo) de inflamabilidad



### 6.9.6 Conclusión

A pesar de que hemos referenciado una conclusión general en el apartado de obtención de resultados diremos que, para este caso concreto, las conclusiones son las siguientes:

En primer término la geometría y nivel de renovación de la campana son determinantes si se quiere con ellos extinguir o minimizar una región emplazada en una potencial atmósfera inflamable.

En segundo término pueden suceder efectos no deseados por acción directa de otras corrientes convectivas de renovación de la estancia como ilustra este caso.

Para finalizar queda comentar el efecto directo de la extracción en la vertical del derrame, que disminuye notablemente la zona de riesgo inflamable.



## 7. IMPACTO AMBIENTAL DEL PROYECTO

El proyecto que nos ocupa ha consumido una serie de recursos que a continuación se enumeran, por tanto su correspondiente impacto ambiental:

### 7.1 Papel

Han sido necesarios imprimir 4 manuales de uso del programa FLUENT a dos paginas por hoja en B/N mas otros 3 manuales de tutoriales a dos paginas por hoja en Color, por lo que se han empleado aproximadamente 2100 hojas de papel 80gr.

Además ha sido necesario imprimir durante el transcurso del proyecto una serie de casos y reports para facilitar la comunicación entre el alumno y el facultativo, se estima que esta partida asciende a 200 hojas 160gr satinado a color.

Se ha utilizado una libreta de apuntes espiral metálica de 250 hojas durante el periodo de formación en el manejo de las aplicaciones.

Para la impresión de la memoria se estiman 5 copias, de las cuales tres son para el tribunal corrector, una para copia personal y una ultima para la biblioteca familiar. La extensión de la memoria se estima incluidos anexos en 150 hojas que impresas a doble cara da un total de 80 hojas por memoria incluyendo tapas y separadores.

**TOTAL PAPEL: 2950 hojas de papel, 22 + 3.2 kg equivalente a 2 árboles procesados**

### 7.2 Electricidad

Para la instalación de los programas, atendiendo a las dificultades que han surgido han sido necesarias un determinado número de horas que a continuación se estiman. Los aplicativos se instalaron en dos maquinas de las cuales una se debió formatear con las consecuencias colaterales que ello implica, así pues por tanto, solo en instalación y puesta a punto de los programas han sido necesarios 60 días a 30 minutos de media de trabajo por dos maquinas hacen un parcial de 60 horas de luz. El formateo de una de las unidades implico 10 horas mas de trabajo extra instalando otros aplicativos necesarios para el sistema y puesta a punto del mismo. Resultado puesta a punto 70 horas de luz.

Durante la etapa de aprendizaje y simulación se estima que se han trabajado alrededor de 10 meses, de los cuales podemos tomar como efectivos 4 de cada 7 días de estos 10 meses, lo que hace un parcial de 172 días efectivos a una tasa de simulación en este tipo



de días de 8 horas. Así pues obtenemos un cómputo aproximado de 1376 horas de luz empleadas en training y simulación.

Cada hora de luz requiere como mínimo de los siguientes elementos: una CPU que consume aproximadamente 300 Watt y dependiendo del equipo usaremos un monitor de 17'' o un TFT de 19''. EL monitor consume 100 watt y el TFT 50 watt así que promediamos el uso de ambos por 75 watt. Es necesario también luz ambiente de 100 watt y esporádicamente la impresora que tomaremos con un uso de 10horas de impresión acumuladas a 200 watts.

**TOTAL kW/h = 1446 horas x 475 watt + 2kWh (impresora) = 688.85 kWh equivalente a 340 kg CO2 emitidos para obtener tal energía equivalente aproximadamente a 340 árboles**

### 7.3 Otros consumos

En esta partida incluiremos otros consumos como los 8 CDS que se han utilizado como copias de seguridad de los resultados, 50 fundas polietileno tamaño A4 (que se reutilizaran para otras aplicaciones), aproximadamente 10 cartuchos de tinta B/N y color (6 y 4), desplazamientos etc.

**TOTAL CONSUMO EN ÁRBOLES = 342 árboles = 0.08 Hectáreas de bosque**



## 8. PRESUPUESTO DEL PROYECTO

Para estimar el coste de este proyecto lo realizaremos de la siguiente manera: supondremos que trabajamos para un ente privado y por encargo realizaremos un estudio de ATEX en el que incluiremos la simulación de posibles ambientes explosivos o inflamables. Así pues en este apartado desglosaremos la minuta a cobrar por parte del técnico que aplique este proyecto con tal finalidad.

### 8.1 Desplazamientos

Para resolver con éxito el encargo debemos atender a los siguientes aspectos: en una primera fase se han de recoger los datos pertenecientes al emplazamiento que queremos simular, por tanto en esta fase de toma de datos geométricos deberemos o bien desplazarnos al lugar para tomarlos o bien se nos facilitaran. Supongamos que esta parte es simplificada por parte del contratante y nos facilita la/s geometría/s a simular.

COSTE DESPLAZAMIENTOS 0.22 EUROS / KILOMETRO + PEAJES

### 8.2 Creación malla

Una vez disponemos de los datos geométricos procedemos a la creación de la malla, lo cual tiene dos inconvenientes. El primer inconveniente es que es un trabajo de precisión y no admite errores ya que por lo general y dada la configuración de Gambit un determinado error geométrico obliga al usuario a rehacer la malla, supondremos que esto ocurre una de cada cuatro veces. El segundo inconveniente es que el mallado dependerá del equipo informático que estemos utilizando así que para una buena maquina aquí grabaremos las amortizaciones pertinentes.

COSTE CREACION MALLA 10 EUROS / HORA



### 8.3 Previo simulación

En el momento que disponemos de la malla deberemos preparar la simulación lo que por lo general nos implicara dos fases: Primera fase de cálculos de tasa de emisión según los modelos previstos en este proyecto, estimamos entre una y dos horas. Este es un trabajo de calculista que entendemos que se paga al doble que el de mallado por ser especializado. Y una segunda fase en la que preparamos propiamente la simulación con Fluent, lo que nos ocupara una hora como mucho a igual precio que la hora de mallado

COSTE PREVIO SIMULACION  $20 * 2 \text{ horas} + 10 * 1 \text{ hora} = 50 \text{ EUROS STNDAR}$

### 8.4 Simulación

En este momento todo depende del simulador y como es de prever las simulaciones serán complejas por lo que podemos estimar para un equipo de última generación un tiempo de simulación de entre uno y dos días. Aquí aplicaremos el derecho de los royalties y su debida amortización, lo que estimaremos inicialmente a 2 EUROS la hora de simulación

COSTE DE SIMULACION 2 EUROS / HORA

### 8.5 Análisis de resultados con el cliente

Análisis de resultados, como fase final del proyecto aplicado a la iniciativa privada. Esta fase se realiza en conjunto con el cliente, recomendando medidas a tomar, salvaguardas geométricas así como obstáculos, ventilaciones etc. Y en definitiva esta fase, quizás la mas importante no será cobrada en fase de implantación del proyecto y si este se consolida se pueden grabar aquí importantes beneficios de la minuta en función siempre de las leyes de oferta y demanda del mercado.

### 8.6 Amortización de las licencias

Para poder preparar y realizar las simulaciones debemos hacerlo de forma legal, así que esto implica adquirir y amortizar las licencias de Gambit y Fluent que ascienden a 2000 y 6000 Euros respectivamente. Si consideramos una amortización como software a un año pues cada año se debe de renovar, y en un año podemos realizar unos 10 casos, el importe de la amortización por caso realizado será de  $(6000+2000)/10=800$  euros

COSTE AMORTIZACION LICENCIA 800 EUROS





## 8.6 Ejemplo coste caso charco tolueno

Dado que este fue uno de los casos de estudio que mostró resultados satisfactorios sin necesidad de repetir demasiadas veces el proceso completo nos sirve de ejemplo para estimar que coste hubiera tenido en el mercado.

TOMA DE DATOS / DESPLAZAMIENTO = 0 EUROS

CREACION MALLA 2 horas = 20 EUROS

PREVIO SIMULACION = 50 EUROS

COSTE SIMULACION 4 horas = 8 EUROS

COSTE AMORTIZACION LICENCIA = 800 EUROS

TOTAL SIN IVA = 878 EUROS

16 % IVA = 140.48 EUROS

**TOTAL SIMULACION CON IVA. = 1018.48 EUROS**



## Conclusiones

Recuperando nuestros objetivos propuestos podemos decir que se pueden simular atmósferas explosivas mediante métodos CFD, pues en el proyecto así se ha conseguido.

Ciertas simulaciones no han podido ser ratificadas por los métodos analíticos actuales de cálculo de volúmenes inflamables. Esto es debido a que la norma UNE-EN 60079-10 sólo tiene en cuenta el escenario de dilución perfecta para el compuesto hasta el del límite inferior de inflamabilidad. Además incorpora en sus formulas parámetros de mayorización y parámetros de seguridad que incrementan el volumen idealmente calculado. En conclusión podemos decir que la simulación se acerca a un entorno más real pero menos conservador que la norma, lo cual era un resultado esperado ya que el caso inverso sería inaceptable.

En tercer lugar podemos hacer una clasificación de las zonas ATEX en función del resultado de la simulación y el cálculo de frecuencia con la que se produce la atmósfera, así pues, se establece este como un método alternativo de cálculo de zonas ATEX.

Cabe decir que para escenarios sencillos será más versátil obtener la clasificación de zona ATEX como también el alcance de la atmósfera inflamable mediante los métodos empleados actualmente (pictogramas y fórmulas). Para escenarios mas complejos dónde la geometría es determinante y los anteriores métodos carecen de precisión, puede ser recomendable utilizar el proceso de simulación que en este trabajo se plantea. Queda entonces a criterio del usuario evaluar la posibilidad de realizar una primera clasificación de su escenario en función de los métodos actuales y una posterior verificación de ajuste fino mediante la simulación por CFD.

De cara a la industria la utilización de este método propuesto puede no ser ágil en clasificación de zonas para toda una planta, en este contexto se recomienda la utilización de los métodos analíticos actuales, salvo para escenarios de compleja geometría o dudosa predicción fluidodinámica en el que es más útil la simulación por CFD.

Una de las variaciones a la simulación de CFD que pueden dar continuidad a este proyecto, es el efecto de la ventilación localizada. Es aquí donde un posterior trabajo puede arrojar soluciones sobre el comportamiento de los vapores inflamables en lugares con alto riesgo de incendio o explosión.



## Bibliografía

- [1] VICENT PONS I GRAU. *Dinámica del fuego. Origen y causa de los incendios*. Picanya: Edicions del Bullent, SL. Nov 2003
- [2] FRANCESC ESCUER IBARS y JAVIER GARCIA TORRENT. *Manual práctico para la Clasificación de atmósferas explosivas*. Barcelona: CETIB Feb 2005.
- [3] JOSEP ARNALDOS i EULÀLIA PLANAS. *Fenòmens de transport. Problemas i Taules*. Barcelona: ETSEIB CPDA sep 2003
- [4] R. B. BIRD *Fenómenos de transporte*. México: editorial Reverté 1997
- [5] JOAQUIM CASAL- MONTIEL – PLANAS- VILCHEZ. *Análisis del riesgo en instalaciones industriales*. Barcelona: edicions UPC 1999
- [6] KAWAMURA AND MACKAY. *The evaporation of volatile liquids*. Hazard mat. 1987..
- [7] GAMBIT. *Modeling guide*. Lebanon may 2000
- [8] FLUENT 6.1 *Users guide volume 1,2,3* Lebanon 2003
- [9] FLUENT 6.1 *Tutorial guide volume 1,2* Lebanon feb 2003



## ANEXO A: MARCO LEGAL

### A.1 Introducción

La inflamación accidental de una atmósfera con gran cantidad de gas, vapor o nieblas puede ocasionar una explosión. Para evitar pérdidas humanas y daños materiales se han tomado ciertas medidas de implantación internacional. Estas medidas afectan principalmente a industrias químicas y petroquímicas, en donde se forman ambientes explosivos durante la producción, transformación, transporte y almacenamiento de productos inflamables. Éstas afectan igualmente a las instalaciones en las que se producen productos pulverulentos combustibles (molienda, tamizado).

### A.2 Algunas Definiciones

#### ¿Que es una atmósfera con riesgo de explosión?

Para que se desencadene una explosión han de coincidir **3 elementos**:

- A- El **oxígeno** del aire = **Siempre** presente
- B- El **combustible** (gas, vapores, nieblas o polvos)
- C- Una **fuentes de inflamación**: Aparatos / instalaciones eléctricas o cualquier fuente de calor



Fig. A.2-1. Tetraedro del fuego



Para producir una explosión no son indispensables una chispa o una llama. El aumento de la temperatura superficial de un aparato puede provocar una explosión si sobrepasa el valor de la temperatura de inflamación del gas que hay en el ambiente.

### **¿Que es una atmósfera explosiva?**

Es una atmósfera susceptible de explotar (el peligro existe potencialmente) como consecuencia de fallos en la instalación: fugas, roturas en canalizaciones, variaciones térmicas, etc.

### **¿Que es una atmósfera explosiva gaseosa o polvorienta?**

Es una atmósfera constituida por una mezcla de aire, en las condiciones atmosféricas, y por sustancias inflamables en forma de gas, vapores, nieblas o polvo, en la cual, después de la inflamación, la combustión se propaga al conjunto de la mezcla no quemada. (Definición según directiva 1999/92/CE)

### **¿Que diferencia fundamental existe entre una atmósfera gaseosa y polvorienta?**

Es la masa volumétrica. La de los gases y vapores es alrededor de 1000 veces menor que la del polvo. Los gases se dispersan en el aire por convección y por difusión formando una atmósfera homogénea. El polvo es mucho mas pesado que el aire y tiene tendencia a depositarse más o menos rápidamente.

### **¿Cuales son las particularidades de una atmósfera explosiva polvorienta?**

Se trata de una atmósfera en la que se reúnen cuatro condiciones:

- El polvo debe ser inflamable (granulometría generalmente  $< 0,3$  mm)
- La atmósfera debe contener un comburente (Generalmente oxígeno incluso en muy baja cantidad)
- El polvo debe estar en suspensión (La explosión resulta de una combustión muy rápida del polvo en el oxígeno del aire).
- La concentración de polvo debe estar en el campo explosivo (Como regla general, el límite inferior de explosividad se sitúa alrededor de  $50 \text{ g/m}^3$ ).



## A.3 Marco Legislativo

### A.3.1 ¿Que es ATEX?

Tras la palabra ATEX, que resulta de la abreviatura de **AT**mósfera **EX**plosiva, se enmarca una serie de Directivas Europeas que han sido traspuestas a los derechos nacionales de los estados miembros, y que son de obligado cumplimiento.

<u>Directiva Europea</u>	<u>Temática</u>	<u>Legislación Española</u>
94/9/CE (ATEX-100)	Aparatos y sistemas de protección para uso en atmósferas <b>explosivas</b> .	Real Decreto 400/1996
1999/92/CE (ATEX-137)	Protección de la Seguridad y la Salud de los trabajadores expuestos a los riesgos derivados de la presencia de atmósferas <b>explosivas</b> en el lugar de trabajo.	Real Decreto 681/2003

Tabla A.3.1-1 Traducción normativa europea a legislación española

### A.3.2 Protección contra explosiones

Dentro del concepto general de la protección de la seguridad y salud de los trabajadores, ocupa un lugar con entidad propia la protección de los mismos frente a los riesgos de explosiones. Las explosiones amenazan, por los efectos graves que pueden tener, la vida y la seguridad de los trabajadores. En este marco las Directivas ATEX establecen las medidas necesarias para garantizar la seguridad frente a las explosiones.

### A.3.3 Atmósferas Explosivas

**Atmósferas de gas explosivas:** Es una mezcla de una sustancia inflamable en estado de gas o vapor con el aire, en condiciones atmosféricas, en la que, en caso de ignición, la combustión se propaga a toda la mezcla no quemada.

**Atmósfera de polvo explosivo:** Mezcla de aire, en condiciones atmosféricas, con sustancias inflamables bajo la forma de polvo o de fibras en las que, en caso de ignición, la combustión se propaga al resto de la mezcla no quemada.



### A.3.4 Actividades Afectadas

A continuación se enumera una lista no exhaustiva de actividades que se ven afectadas por los riesgos de explosión, y que por tanto, deben cumplir con las Directivas ATEX sobre esta temática.

#### **a) Industria Química**

En la industria química se transforman y emplean gases, líquidos y sólidos inflamables en multitud de procesos.

En estos procesos pueden formarse mezclas explosivas.

- Plantas de producción y manipulación de azufre.
- Zonas de trabajo, manipulación y almacenamiento.
- Lugares donde se trasvasen líquidos volátiles inflamables de un recipiente a otro.
- Locales con depósitos de líquidos inflamables abiertos o que se puedan abrir.
- Salas de bombas o compresores para gases o líquidos inflamables.
- Instalaciones donde se produzca, manipule, almacene o consuma gas inflamable

#### **b) Vertederos e ingeniería civil**

En los vertederos pueden formarse gases inflamables. Para evitar que éstos escapen de manera incontrolada y puedan llegar a encenderse, se requieren importantes medidas técnicas. En túneles mal ventilados, sótanos, etc. pueden acumularse gases inflamables de fuentes diversas. Los residuos sólidos urbanos generan polvo explosivo.

#### **c) Compañías productoras de energía**

Con el transporte, la molienda y el secado de carbones troceados, no explosivos por su tamaño, se generan polvos de carbón que sí pueden formar mezclas explosivas polvo/aire. Las biomasas y otros combustibles sólidos son explosivos. La refrigeración con H<sub>2</sub> de los alternadores implica riesgo de explosión.

#### **d) Empresas de tratamiento de aguas residuales**

Los gases de digestión generados en el tratamiento de aguas residuales en depuradoras pueden formar mezclas explosivas gas/aire. Los lodos secos también son explosivos.



**e) Compañías de suministro de gas**

En caso de escapes de gas natural por fugas o similar pueden formarse mezclas explosivas gas/aire.

**f) Industrias del trabajo de la madera**

En el trabajo de piezas de madera se generan polvos de madera que pueden formar mezclas explosivas polvo/aire en filtros o en silos.

– Industrias de procesamiento de madera, tales como carpinterías.

**g) Talleres de pintura y esmaltado**

La neblina de pulverización que se forma en el esmaltado de superficies con pistolas de pintura en cabinas de lacado, al igual que los vapores de disolventes liberados, puede provocar una atmósfera explosiva en contacto con el aire. Los pigmentos pulverulentos pueden ser muy explosivos.

– Zonas en el interior de cabinas de pintura con pistolas de pulverización y su entorno cercano.

**h) Fabricación de piezas de metales ligeros y talleres de carpintería metálica**

En la fabricación de piezas de moldeo metálicas, su tratamiento de superficie (amolado) puede generar polvos metálicos explosivos, sobre todo en el caso de los metales ligeros (Aluminio, Titanio, Magnesio, etc.). Estos polvos metálicos pueden provocar riesgos de explosión en separadores y otras operaciones.

– Zonas en las que se producen, procesan, manipulan o empaquetan polvos metálicos de materiales ligeros (Aluminio, Magnesio, etc.)

**i) Instalaciones agropecuarias**

En algunas explotaciones agrícolas se utilizan instalaciones de generación de biogás. En caso de fugas, pueden formarse mezclas explosivas biogás/aire. Las deshidratadoras de forraje, descascarilladoras de almendra y otras instalaciones similares generan atmósferas explosivas.





- Almacenamiento y utilización de fertilizantes (Nitrato Amónico).

#### **j) Reparación de vehículos**

Normalmente las cantidades de productos inflamables son reducidas y el confinamiento y la ventilación hacen innecesaria la clasificación (ver párrafo 4.4). No obstante, con carácter general, debe analizarse la posibilidad de formación de atmósferas explosivas si existen cantidades importantes de materias inflamables.

- Garajes y talleres de reparación de vehículos, excepto privados.

#### **k) Lavanderías y tintorerías**

- Zonas de lavanderías y tintorerías con líquidos inflamables.

#### **l) Industria alimentaria**

El transporte y almacenamiento de harinas, granos y derivados pueden generar polvos explosivos. Si éstos se aspiran y separan en filtros, puede aparecer una atmósfera explosiva en el filtro.

- Locales de extracción de grasas y aceites que utilicen disolventes inflamables.
- Secaderos de material con disolventes inflamables.
- Zonas de trabajo, manipulación y almacenamiento.
- Entre los polvos combustibles tenemos la harina y derivados, el almidón, el azúcar, el cacao, la leche y el huevo en polvo, las especias, etc.
- Fábricas de harina panificable.
- Fabricación de pan y productos de panadería.

#### **m) Industria farmacéutica**

En la producción farmacéutica a menudo se emplean alcoholes como disolventes. También pueden utilizarse sustancias sólidas activas y auxiliares explosivas, por ejemplo lactosa, vitaminas, paracetamol, etc.

- Zonas de trabajo, manipulación y almacenamiento.



**n) Refinerías**

Los hidrocarburos manejados en las refinerías son todos ellos inflamables y, según su punto de inflamación, pueden provocar atmósferas explosivas incluso a temperatura ambiente. El entorno de los equipos de transformación petrolífera casi siempre se considera zona con riesgo de explosión.

**o) Industrias de reciclado de residuos**

El tratamiento de residuos reciclables puede entrañar riesgos de explosión por envases no vaciados por completo de su contenido de gases o líquidos inflamables o por polvos de papel o materias plásticas.

**p) Industria textil y afines**

- Almacenes y muelles de expedición (sacos o contenedores).
- Zonas de tratamiento de textiles, como algodón.
- Plantas de fabricación y procesado de fibras.
- Plantas desmotadoras de algodón.
- Plantas de procesado de lino.
- Talleres de confección.

**q) Locales de utilización de productos químicos inflamables**

- Lugares donde se trasvasen líquidos volátiles inflamables de un recipiente a otro.
- Locales con depósitos de líquidos inflamables abiertos o que se puedan abrir.
- Salas de bombas o compresores para gases o líquidos inflamables.
- Instalaciones donde manipulen, almacenen o consuman gases inflamables.

**r) Industrias agrarias**

- Fabricación de piensos compuestos.
- Elaboración de correctores vitamínico-minerales.
- Silos para almacenamiento de cereales. Entre los polvos combustibles tenemos los cereales, granos y derivados, almidón, heno.



– Secadero de cereales y deshidratadoras de alfalfa.

#### **s) Industrias forestales y afines**

– Aserraderos de madera.

– Fabricación de papel y celulosa.

– Zonas de trabajo, manipulación y almacenamiento.

### **A.4 ATEX 100 (94/9/CE) (RD 400/1996)**

El Real Decreto 400/1996, de 1 de marzo, dicta las disposiciones de aplicación de la Directiva del Parlamento Europeo y del Consejo “94/9/CE”, relativa a los aparatos y sistemas de protección para uso en atmósferas potencialmente explosivas (BOE de 8 de abril de 1996).

#### **A.4.1 Objetivo de la directiva**

Su objetivo es garantizar en el territorio de la UE la libre circulación de los productos que entran dentro de su ámbito de aplicación.

#### **A.4.2 Campo de aplicación**

Este Real Decreto se aplica a los aparatos y sistemas de protección para uso en atmósferas potencialmente explosivas. Se aplica, asimismo, a los dispositivos de seguridad, control y reglaje destinados a utilizarse fuera de atmósferas potencialmente explosivas, pero que son necesarios, o que contribuyen al funcionamiento seguro de los aparatos y sistemas de protección, en relación con los riesgos de explosión.

- Se entiende por aparatos las máquinas, los materiales, los dispositivos fijos o móviles, los órganos de control y la instrumentación, los sistemas de detección y prevención que, solos o combinados, se destinan a la producción, transporte, almacenamiento, medición, regulación, conversión de energía y transformación de materiales y que, por las fuentes potenciales de ignición que los caracterizan, pueden desencadenar una explosión.
- Se entiende por sistemas de protección los dispositivos, distintos de los componentes de los aparatos definidos anteriormente, cuya función es la de detener inmediatamente las explosiones incipientes y/o limitar la zona afectada por una explosión, y que se comercializan por separado como sistemas con funciones autónomas.



- Se entiende por “componentes” las piezas que son esenciales para el funcionamiento seguro de los aparatos y sistemas de protección, pero que no tienen función autónoma.

#### A.4.3 Fecha de aplicación y derogaciones

Obligatoria a partir del 1 de julio de 2003.

Deroga las Directivas 76/117/CEE, 79/196/CEE y 82/130/CEE

#### A.4.4 Exclusiones

Quedan excluidos del este Real Decreto (*y por tanto de la Directiva 94/9/CE*):

- Los dispositivos médicos para uso en un entorno sanitario.
- Los aparatos y sistemas de protección cuando el peligro de explosión se deba exclusivamente a la presencia de sustancias explosivas o sustancias químicas inestables.
- Los equipos destinados a usos en entornos domésticos y no comerciales, donde las atmósferas potencialmente explosivas se crean muy rara vez, únicamente como consecuencia de una fuga fortuita de gas.
- Los equipos de protección individual, que están regulados por el Real Decreto 1407/1992, de 20 de noviembre, modificado por el Real Decreto 159/1995, de 3 de febrero, de aplicación de la Directiva 89/686/CEE.
- Los navíos marinos y las unidades offshore (instalaciones marítimas móviles), así como los equipos a bordo de los mismos. No se excluyen instalaciones marítimas fijas ni sus equipos de a bordo, así como tampoco las embarcaciones que no se consideren de navegación marítima (que pesen menos de 500 Tm y no hayan sido diseñadas para navegar por alta mar, sino para la navegación interior en ríos, canales y lagos).
- Los medios de transporte, es decir, los vehículos y sus remolques destinados únicamente al transporte de personas o mercancías por vía aérea, red vial, red ferroviaria o vías acuáticas. No están excluidos los vehículos destinados al uso en una atmósfera potencialmente explosiva.
- Los equipos contemplados en el párrafo b) del apartado 1 del artículo 223 del Tratado de Roma (equipos específicos para las fuerzas armadas o para el mantenimiento de la ley y el orden).



#### A.4.5 Aplicación junto a otras directivas

- **Directiva 89/336/CEE (Compatibilidad electromagnética)**

Aplicable. *(En algunas aplicaciones el nivel normal de inmunidad que establece la 89/336/CEE puede no bastar para la 94/9/CE).*

- **Directiva 73/23/CEE (Baja tensión)**

No aplicable. *(La 94/9/CE contempla de por sí todos los objetivos esenciales de baja tensión).*

- **Directiva 98/37/CE (Directiva de máquinas)**

Aplicable. *(La 98/37/CE establece requisitos muy generales en relación con los riesgos de explosión y, para éstos, la 94/9/CE tendrá preferencia; para otro tipo de riesgos se estará a lo dispuesto en la 98/37/CE).*

- **Directiva 94/55/CE (Transporte de mercancías peligrosas por carretera)**

No aplicable, salvo casos particulares. *(A fin de evitar un posible solapamiento de ambas Directivas, la mayoría de los medios de transporte están excluidos de la 94/9/CE. En general, los vehículos que regula la 94/9/CE no abandonan las instalaciones del usuario. Ambas Directivas podrían aplicarse si, por ejemplo, se trata de un medio de transporte destinado tanto a transportar mercancías peligrosas, en este caso inflamables, por la vía pública y también en emplazamientos con atmósferas potencialmente explosivas).*

- **Directiva 89/686/CEE (Equipos de protección individual) (EPI)**

No aplicable.

- **Directiva 89/106/CEE (Productos de construcción) (DPC)**

Aplicable.

#### A.4.6 Grupos y categorías de aparatos

- **Grupo I**

Formado por aquellos aparatos destinados a trabajos subterráneos en las minas y en las partes de sus instalaciones de superficie, en las que puede haber peligro debido al grisú y/o al polvo combustible.

Dentro de este Grupo existen dos Categorías: M1 y M2.

- **Grupo II**

Formado por aquellos aparatos destinados al uso en otros lugares en los que puede haber peligro de formación de atmósferas explosivas.

Dentro de este Grupo existen tres Categorías: 1, 2 y 3.



- Categoría 1:

Aparatos con muy alto nivel de protección, previstos para su utilización en un medio ambiente en el que se produzcan de manera constante, duradera o frecuente atmósferas explosivas.

- Categoría 2:

Aparatos con alto nivel de protección, previstos para su utilización en un medio ambiente en el que sea probable la formación de atmósferas explosivas.

- Categoría 3:

Aparatos con nivel normal de protección, previstos para su utilización en un medio ambiente en el que sea poco probable la formación de atmósferas explosivas y que, con arreglo a toda probabilidad, su formación sea infrecuente y su presencia de corta duración.

## A.5 ATEX 137 (1999/92/CE) (RD681/2003)

Real Decreto 681/2003, de 12 de junio, sobre la protección de la salud y la seguridad de los trabajadores expuestos a los riesgos derivados de atmósferas explosivas en el lugar de trabajo (BOE de 18 de junio).

### A.5.1 Objetivo de la directiva

Su objetivo es garantizar en el territorio de la UE la libre circulación de los productos que entran dentro de su ámbito de aplicación.

### A.5.2 Campo de aplicación

A los efectos de esta Directiva, se entenderá por atmósfera explosiva la mezcla con el aire, en condiciones atmosféricas, de sustancias inflamables en forma de gases, vapores, nieblas o polvos, en la que, tras una ignición, la combustión se propaga a la totalidad de la mezcla no quemada.

### A.5.3 Fecha de aplicación y derogaciones

Obligatorio a partir del 1 de julio de 2003

### A.5.4 Exclusiones

Quedan excluidos del este Real Decreto (*y por tanto de la Directiva 1999/92/CE*):

- Las áreas utilizadas directamente para el tratamiento médico de pacientes y durante dicho tratamiento.
- La utilización reglamentaria de aparatos de gas conforme a su formativa específica.



- La fabricación, manipulación, utilización, almacenamiento y transporte de explosivos o sustancias químicamente inestables.
- Las industrias extractivas por sondeos y las industrias extractivas a cielo abierto y subterráneas, tal como se definen en su normativa específica.
- La utilización de medios de transporte terrestres, marítimo y aéreo, a los que se aplican las disposiciones correspondientes de convenios internacionales, así como la normativa mediante la que se da efecto a dichos convenios. No se excluirán los medios de transporte diseñados para su uso en una atmósfera potencialmente explosiva

#### A.5.5 Aplicación junto a otras directivas

- **Directiva 89/391/CEE (Seguridad y salud de los trabajadores)**

Aplicable. *(La Directiva 1999/92/CE complementa la 89/391/CEE en entornos con riesgos de explosión debido a atmósferas explosivas).*

#### A.5.6 Obligaciones del empresario

- Impedir la formación de atmósferas explosivas, o, cuando no sea posible, evitar su ignición y atenuar los efectos perjudiciales de una explosión, de manera que se garantice la salud y seguridad de los trabajadores.
- Realizar una evaluación de riesgos que incluya la probabilidad de formación atmósferas explosivas y la presencia de posibles focos de ignición.
- Clasificar los lugares de trabajo por Zonas, dependiendo de la frecuencia y duración con que se producen atmósferas explosivas.
- Marcar las áreas en las que puedan formarse atmósferas explosivas *(Triángulo con las letras Ex en su interior; bordes y letras en negro con fondo amarillo).*
- Crear y mantener el Documento de protección contra explosiones.
- Seleccionar los equipos y aparatos que cumplan la Directiva ATEX 94/9/CE, de acuerdo con las Zonas pertinentes.



### A.5.7 Clasificación de emplazamientos o áreas

*Nota: La Directiva 1999/92/CE solo clasifica las áreas por Zonas. La ITC MIE-BT 029 del Reglamento de baja tensión español recoge también el concepto de Clase.*

#### **Clase I**

Comprende los emplazamientos en los que hay o puede haber gases, vapores o nieblas en cantidad suficiente para producir atmósferas explosivas o inflamables. Se incluyen en esta clase los lugares en los que hay o puede haber líquidos inflamables.

Se distinguen las siguientes zonas:

- **Zona 0**

Emplazamiento en el que la atmósfera explosiva está presente de modo permanente, por un espacio de tiempo prolongado o frecuentemente.

- **Zona 1**

Emplazamiento en el que cabe contar, en condiciones normales de funcionamiento, con la formación ocasional de atmósfera explosiva.

- **Zona 2**

Emplazamiento en el que no cabe contar, en condiciones normales de funcionamiento, con la formación ocasional de atmósfera explosiva, y en la que, en caso de formarse, solo subsiste por espacios de tiempo muy breves.

#### **Clase II**

Comprende los emplazamientos en los que hay o puede haber polvos inflamables.

Se distinguen las siguientes zonas:

- **Zona 20**

Emplazamiento en el que la atmósfera explosiva, en forma de nube de polvo inflamable, está presente de modo permanente, por un espacio de tiempo prolongado o frecuentemente. *(Las capas en si mismas no constituyen una zona 20. En general estas condiciones se dan en el interior de conducciones, recipientes, etc. Los emplazamientos en los que hay capas de polvo pero no hay nubes de forma continua o durante largos periodos de tiempo no entran en este concepto).*

- **Zona 21**

Emplazamiento en el que cabe contar, en condiciones normales de funcionamiento, con la formación ocasional de atmósfera explosiva, en forma de nube de polvo inflamable. *(Esta zona puede incluir, entre otros, los emplazamientos en la inmediata vecindad de, por ejemplo, lugares de vaciado o llenado de polvo).*





- **Zona 22**

Emplazamiento en el que no cabe contar, en condiciones normales de funcionamiento, con la formación ocasional de atmósfera explosiva, en forma de nube de polvo inflamable, y en la que, en caso de formarse, solo subsiste por espacios de tiempo muy breves. *(Esta zona puede incluir, entre otros, entornos próximos de sistemas conteniendo polvo de los que puede haber fugas y formar depósitos de polvo).*



## **ANEXO B: FUNCIONAMIENTO DE GAMBIT. CREACIÓN DE MALLAS**

En primer lugar, antes de proceder con la creación de la malla, conviene que se tenga presente que se va a representar, esto es, hacer un croquis en papel contemplando lo siguiente:

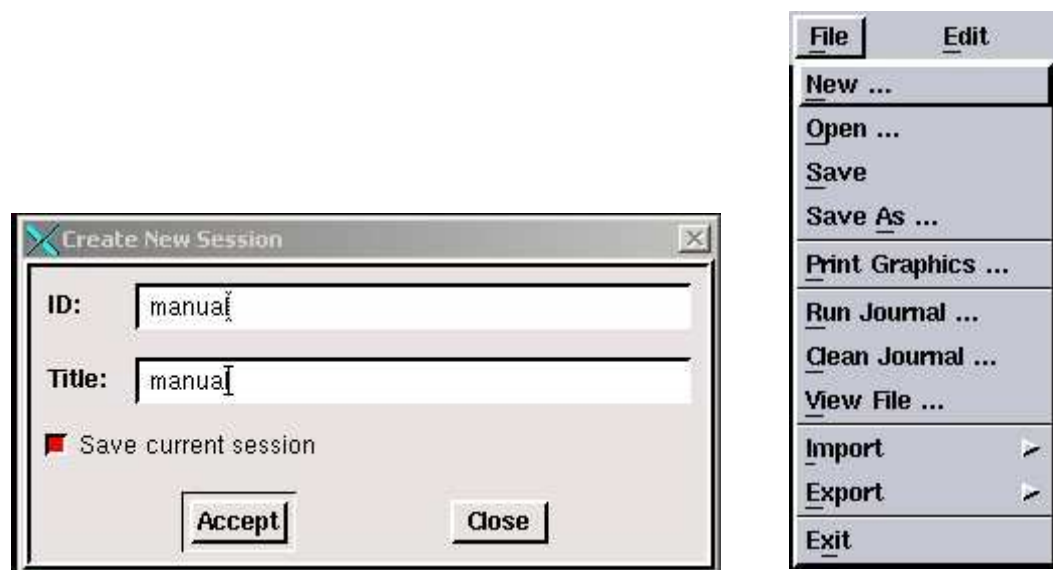
- 1) La malla debe representar el espacio de análisis, por lo que esta será una simplificación de la realidad que queremos simular de tal forma que los elementos que supongan mas complicación de cálculo y no aporten datos relevantes a la simulación serán simplificados a su silueta.
- 2) En el proceso de creación de la malla descubriremos que el método GAMBIT es muy barroco, de tal forma que introduciremos los puntos uno a uno por coordenadas. Esto Implica que las geometrías que queramos representar deben de ser sencillas para introducir en forma de coordenadas. Una recomendación que aquí se puede hacer es dibujar el croquis previo sobre una cuadrícula de tal forma que identificaremos fácilmente las coordenadas (X, Y) en un caso en dos dimensiones.
- 3) Es de recomendación también evitar en medida de lo posible curvas y/o elípticas, puesto que a pesar de que las podremos representar nos va a costar mucho debido a su parametrización por puntos de la curva o por centros de excentricidad. Usaremos este recurso geométrico cuando sea de relevancia para la simulación.
- 4) Se debe procurar cerrar zonas, es decir, aislar unas zonas de otras en la malla pues mas tarde FLUENT no las comunicara. Un caso donde esto se puede apreciar es al representar una conducción a un equipo donde se aíslan dos zonas claramente diferenciadas. Llegado este punto deberemos evaluar si lo que queremos simular es un flujo interno (no afectara la división de zonas) o por el contrario un flujo externo (dónde ambas zonas a los dos lados de la conducción deberán tener una comunicación). Todo esto lo veremos a continuación en ejemplos clarificadores.

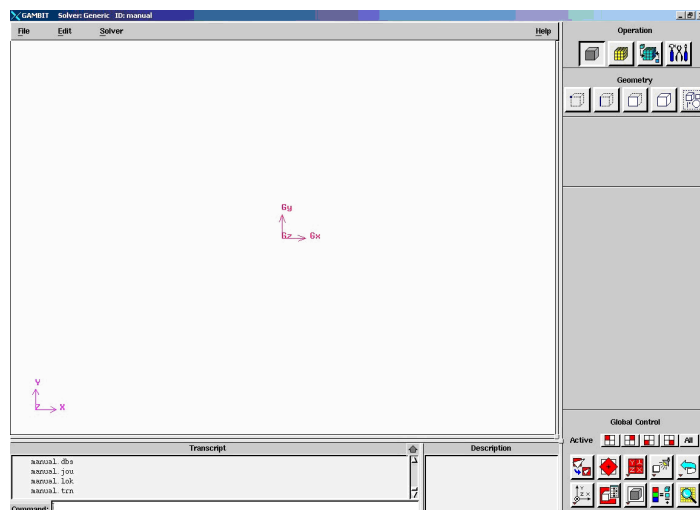


- 5) La malla tendrá una densidad de retícula, por tanto amplias zonas muertas no nos interesan, y de no poder eludirlas deberemos tener presente que estas zonas las reticularemos con una baja densidad de elementos finitos, mientras que las zonas de estudio nos interesan con alta densidad de electos finitos para que el cálculo sea más acurado. Tener presente que a mayor densidad de mallado mayor potencia de procesador necesitaremos, tanto por las ecuaciones que deben converger en cada nodo o arista de los elementos finitos como por las iteraciones a las que someteremos el simulador.

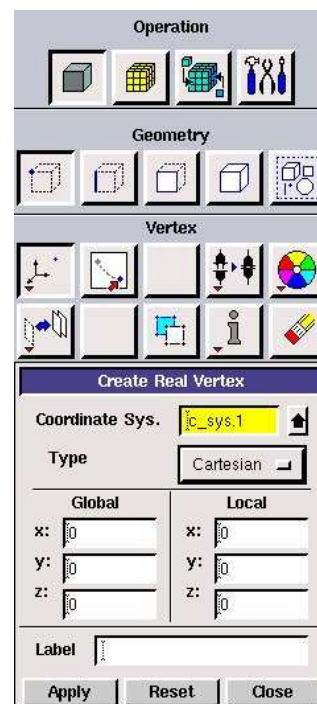
ENTORNO GAMBIT: a pesar de que existe un extenso manual en ingles de manejo de este programa [7], la intención y objeto de este tutorial es acercar al usuario a una manipulación ágil y rápida de este programa. Se considera la posibilidad de explicar todas y cada una de las opciones de esta herramienta, pero entonces perderíamos de vista nuestro objetivo, de tal manera que la mejor opción será ver un ejemplo lo mas ilustrativo posible. El caso que vamos a ver corresponde a la mezcla de dos corrientes de diferente temperatura, para ello deberemos diseñar una malla adecuada a dicho caso.

Procederemos paso a paso a la construcción del archivo exportable en Gambit. En primer lugar diseñaremos un croquis en papel y sobre este una cuadrícula para poder definir con precisión las coordenadas de los puntos del contorno de la malla. Arrancamos la aplicación y abrimos un archivo nuevo.



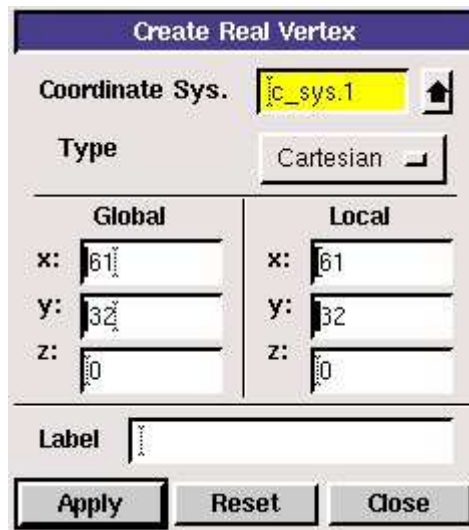


Una vez situados en el entorno de Gambit, seleccionamos la opción "editar volumen" tal y como se muestra en la imagen. Esta opción nos permitirá configurar los puntos que definen el contorno de la malla. Dentro del menú de geometría seleccionamos la opción "introducir punto".



Con esta opción definimos las coordenadas X. Y. de cada vértice de la geometría, en caso de tratarse de una geometría en tres dimensiones introduciremos aquí también la coordenadas Z. una vez definido el vértice presionamos el botón "aplicar". Sucesivamente repetiremos esta secuencia hasta haber completado la mayoría o la totalidad de los puntos que definen el contorno de nuestra malla.



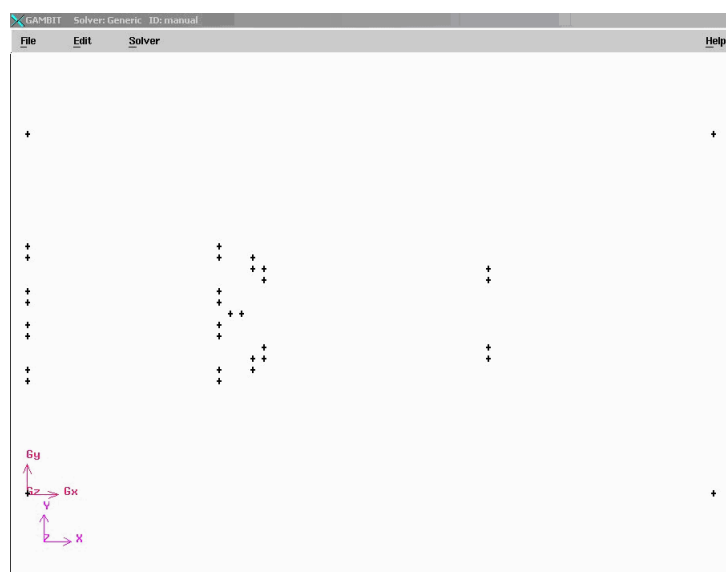


Con el siguiente botón centraremos la imagen de la ventana de edición según su tamaño.

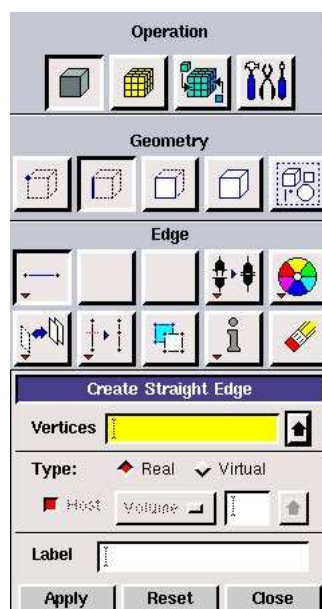


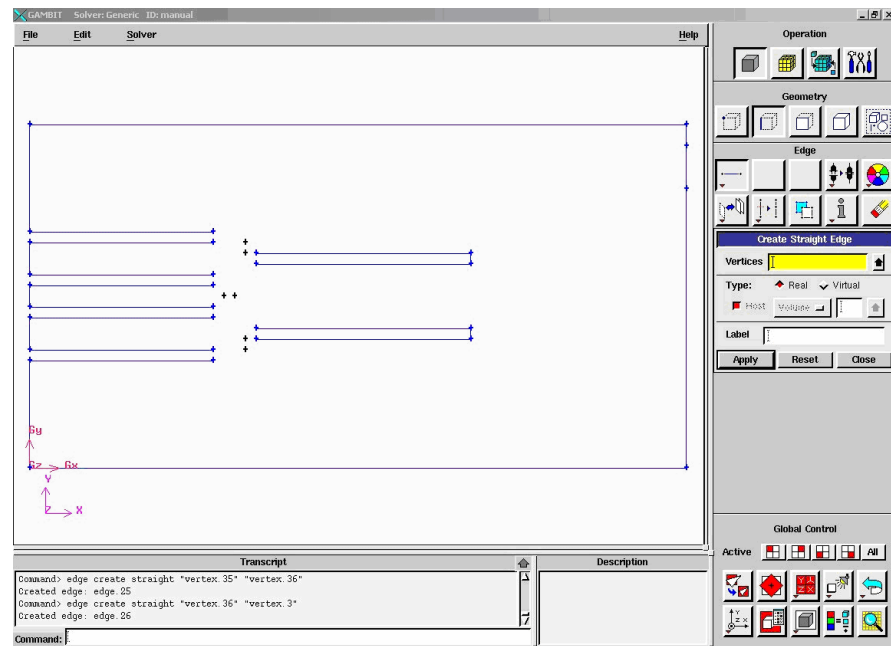
Véase en la siguiente imagen como para este ejemplo hemos introducido un buen número de puntos, cabe destacar que la geometría de esta imagen es en dos dimensiones, y que por tanto sólo utilizaremos una ventana activa maximizada para poder apreciar con mayor resolución los vértices que introducimos en la malla.





Acto seguido uniremos los puntos con líneas rectas líneas curvas, para ello utilizaremos la opción que se ve en la imagen siguiente. Para ello seleccionaremos origen y destino y uniremos mediante línea recta. En caso de ser una línea curva podemos seleccionar en el menú mediante clic con el botón secundario encima del botón que define el tipo de unión entre puntos. En este último caso se puede definir o bien un centro y los puntos de paso o bien tres puntos De paso.





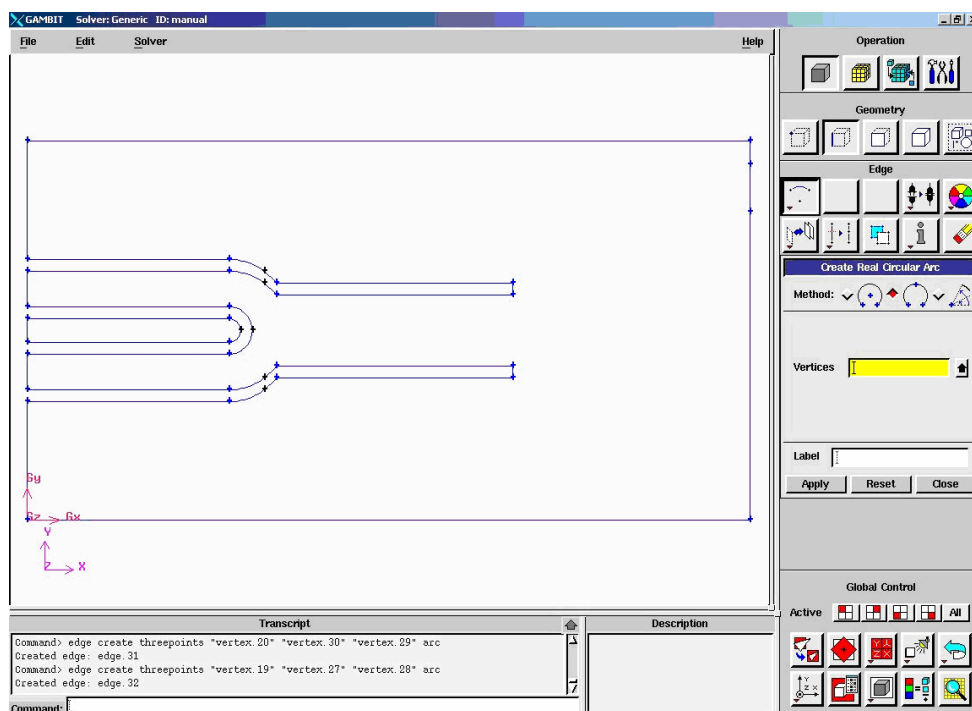
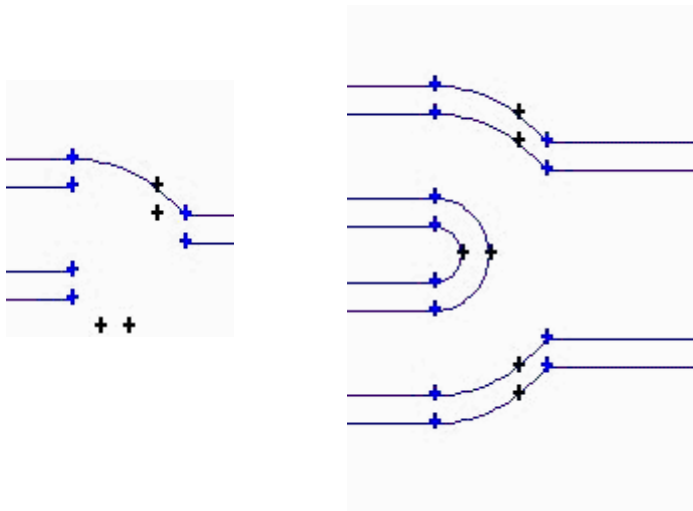
Véase en la imagen como han sido unidos los puntos mediante líneas rectas empezando a definir ya un contorno, queda por tanto definir las líneas curvas.



Para ello desplegamos el menú que nos permite seleccionar el tipo de unión entre puntos, seleccionamos la opción arco y dentro de ella hacemos clic en el siguiente icono:



Así pues seleccionamos los vértices de la curva y aplicamos la acción, el resultado es el que se ve a continuación:



A continuación describiremos una cara como la suma de los lados que están todos en contacto. Para definirla tomaremos la siguiente opción: “operación geométrica, cara” y en ellas seleccionamos la opción “crear cara” como se puede observar en la siguiente imagen.

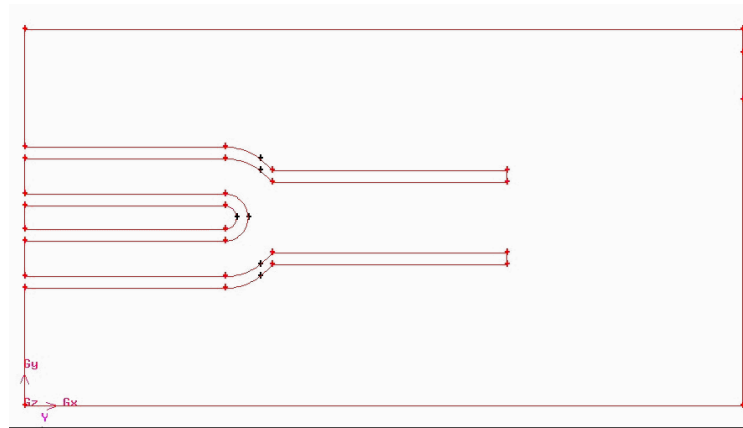




Seleccionamos todos los lados que estén en contacto entre ellos y que configuren una cara, de tal manera que después se pueda realizar un mallado de esta misma cara. Si el programa detecta que alguno de los lados no está conectado aparecerá un mensaje de error, de lo contrario se resaltará la cara de color azul como se muestra en la siguiente imagen:

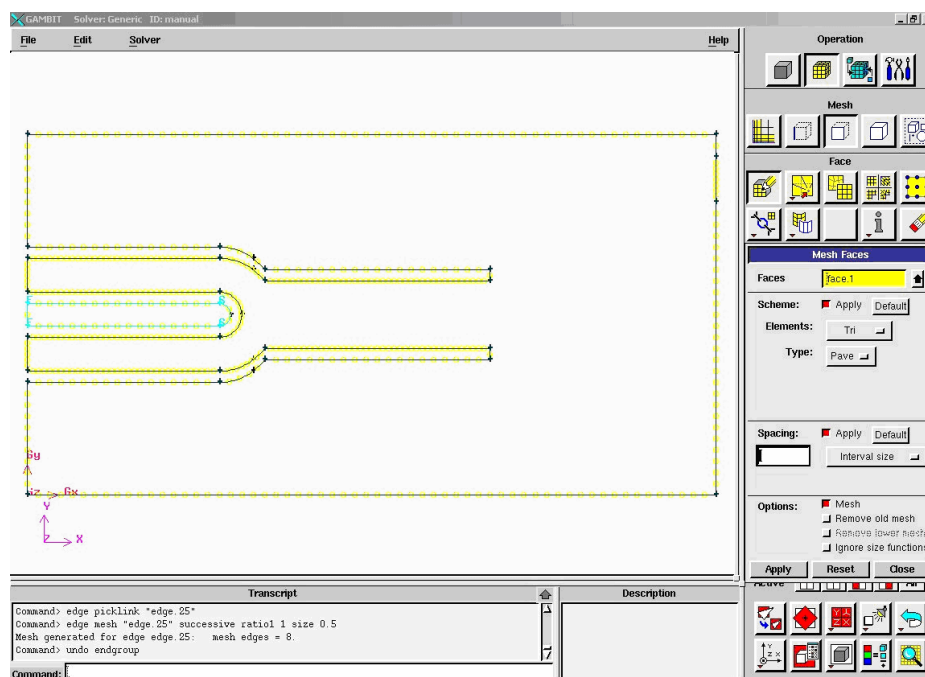
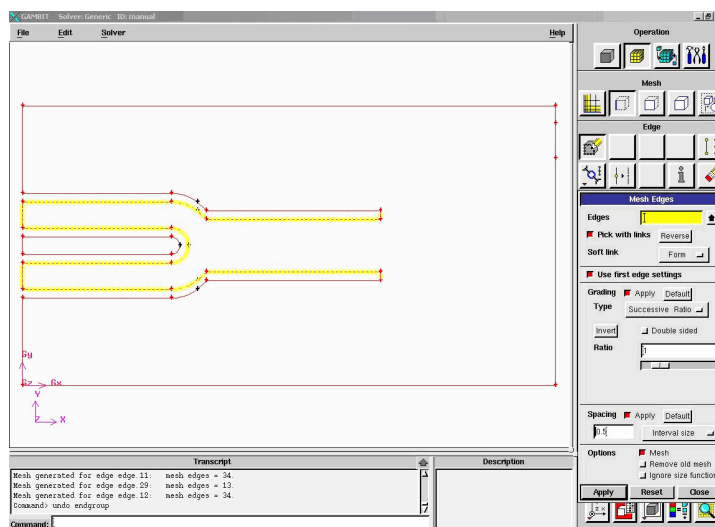
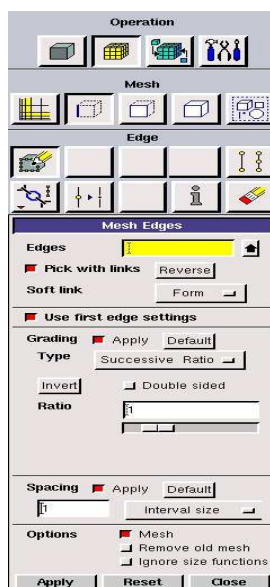


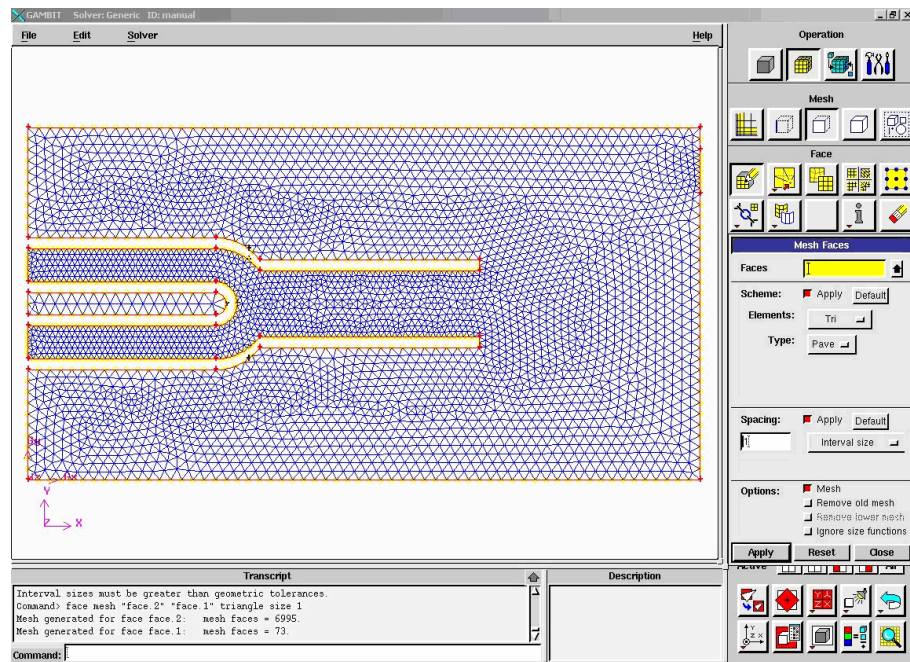
Una vez definidas todas las caras pasamos a parametrizar la densidad de mallado por lados o en conjunto de la siguiente forma: Si queremos dar una densidad específica a unos determinados lados, los habremos de seleccionar y dar esta densidad deseada en la casilla donde se especifica, véase siguientes imágenes.



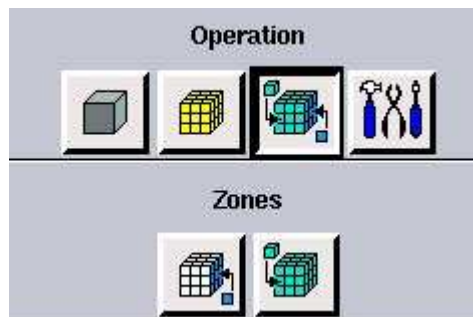
En caso de desear un mallado de densidad homogénea bastará con seleccionar la cara en la segunda línea horizontal de iconos y darle un valor de espaciado. Para proceder al mallado una vez definidos los lados i/o caras pulsaremos el botón de “aplicar” y Gambit mallará la geometría, cabe decir que si en este punto hemos definido diferentes densidades de mallado según los lados estos serán respetados en el momento de construir la malla.



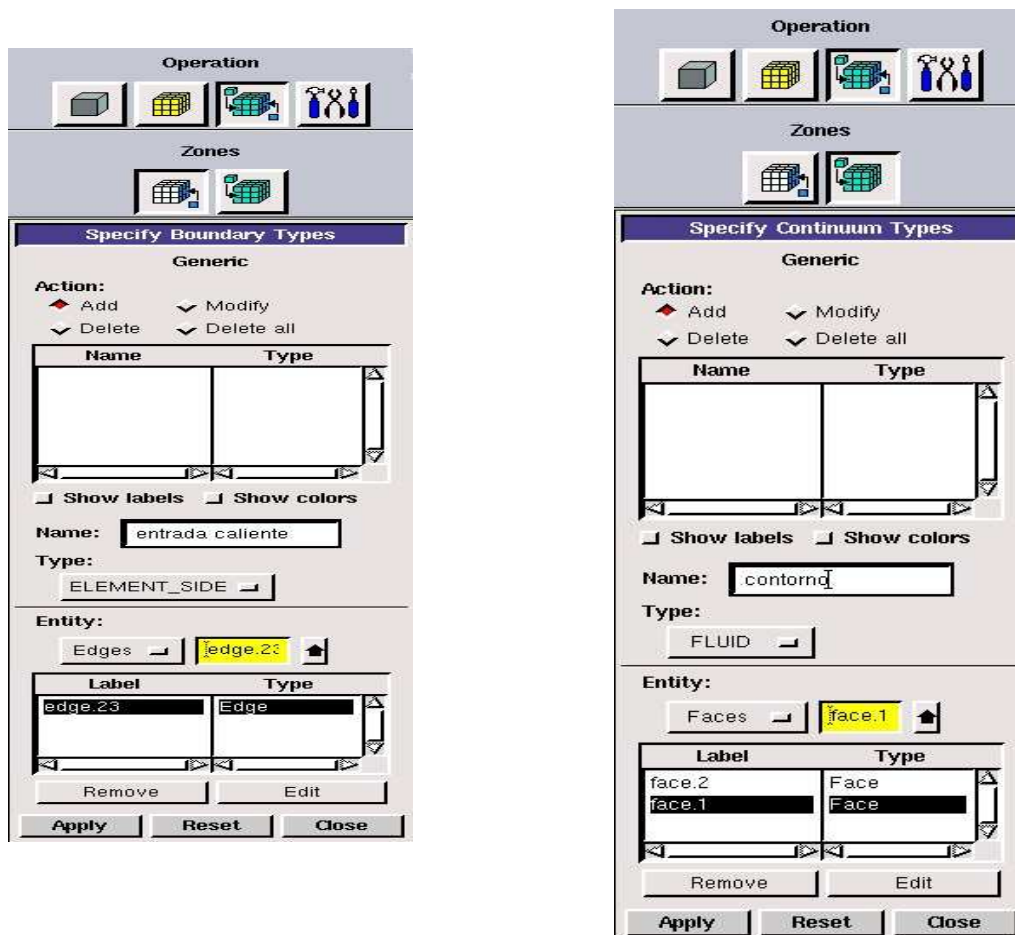




Obsérvese la diferente densidad de mallado según los lados. Una vez alcanzado este punto nos restara definir los lados que queramos en función de la operación que tengan que realizar, esto es, si son de entrada o salida de flujo, si son de venteo etc. Para ello fijémonos en que opción debemos tomar a continuación:



Seleccionamos un determinado lado, le asignamos un nombre representativo que mas tarde aparecerá como condición de contorno en el simulador Fluent y presionamos “aplicar”. Repetimos esta operación para todos los lados en que tengamos una entrada o salida de alguna propiedad.

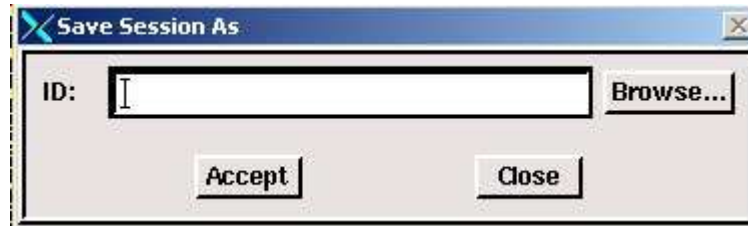


En el caso en que nuestra geometría sea en 3 dimensiones realizaremos este protocolo como se ha descrito hasta este punto añadiendo las condiciones de contorno para los volúmenes que nos interesen tal y como se hizo en el paso anterior con los lados. En esta pantalla podemos seleccionar si se trata de un lado, cara o volumen, lo que flexibiliza la asignación de la propiedad sólido, fluido o poroso para esta determinada geometría.

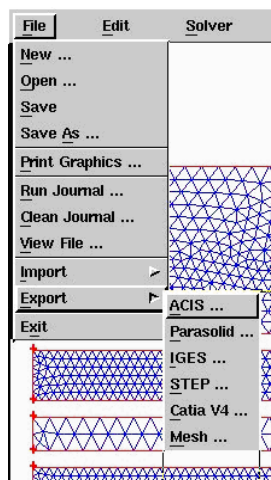


Finalmente salvaremos el caso con un nombre representativo y que nos facilite su localización e identificación.





Por último exportaremos el caso al simulador. “File” > “Export” > “Mesh”

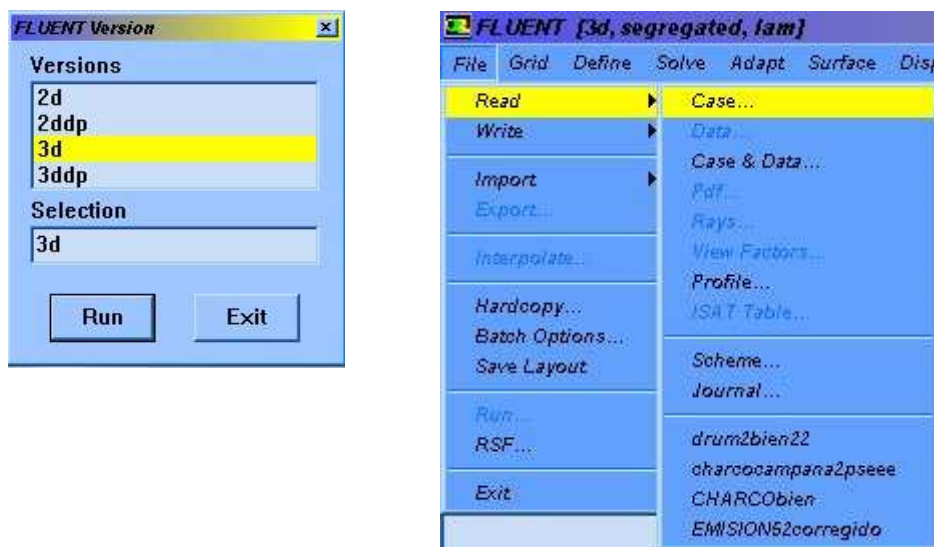


Cerramos el programa Gambit mediante el botón en aspa en la esquina superior derecha, y en la pantalla de MS-DOS pulsamos “intro” para confirmar la salida del programa.

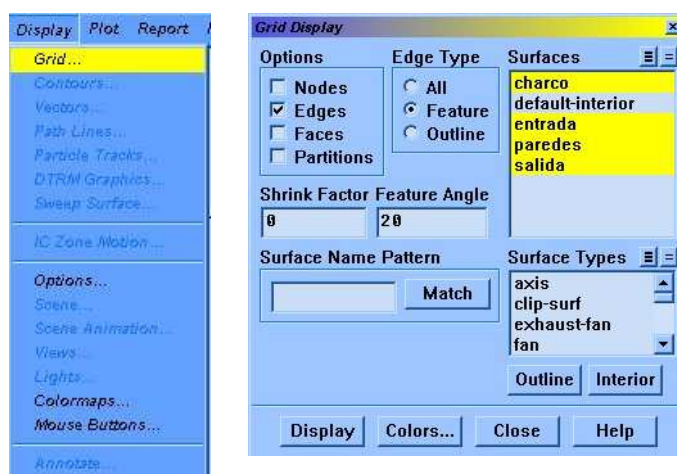


## ANEXO C: FUNCIONAMIENTO DE FLUENT.

En el presente anexo veremos como utilizar de forma práctica el simulador reológico FLUENT. Se mostrará de forma grafica las pantallas aclaratorias que nos irán guiando en el proceso [8] [9]. Para ello utilizaremos el caso simulado del derrame de tolueno, visto en el cuerpo de la memoria, apartado 6.8. La primera selección que haremos con el programa, será definir el tipo de malla que vamos a introducir, en este caso de tres dimensiones. Vemos pues en la segunda imagen como cargar la malla procedente de Gambit

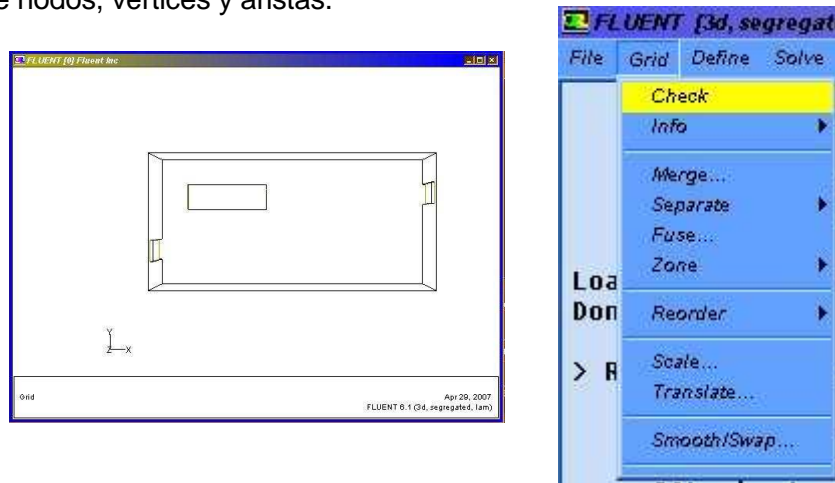


Para leer el caso procedente de Gambit, debemos leer como “Case” el fichero con extensión \*. msh . Una vez abierto el archivo deberemos comprobar si se ha cargado de forma correcta la malla, esto se puede comprobar abriendo el siguiente menú, y haremos un check del mallado, si en algún momento de la creación de la malla hubiéramos cometido un error de geometría en este paso se podría detectar.

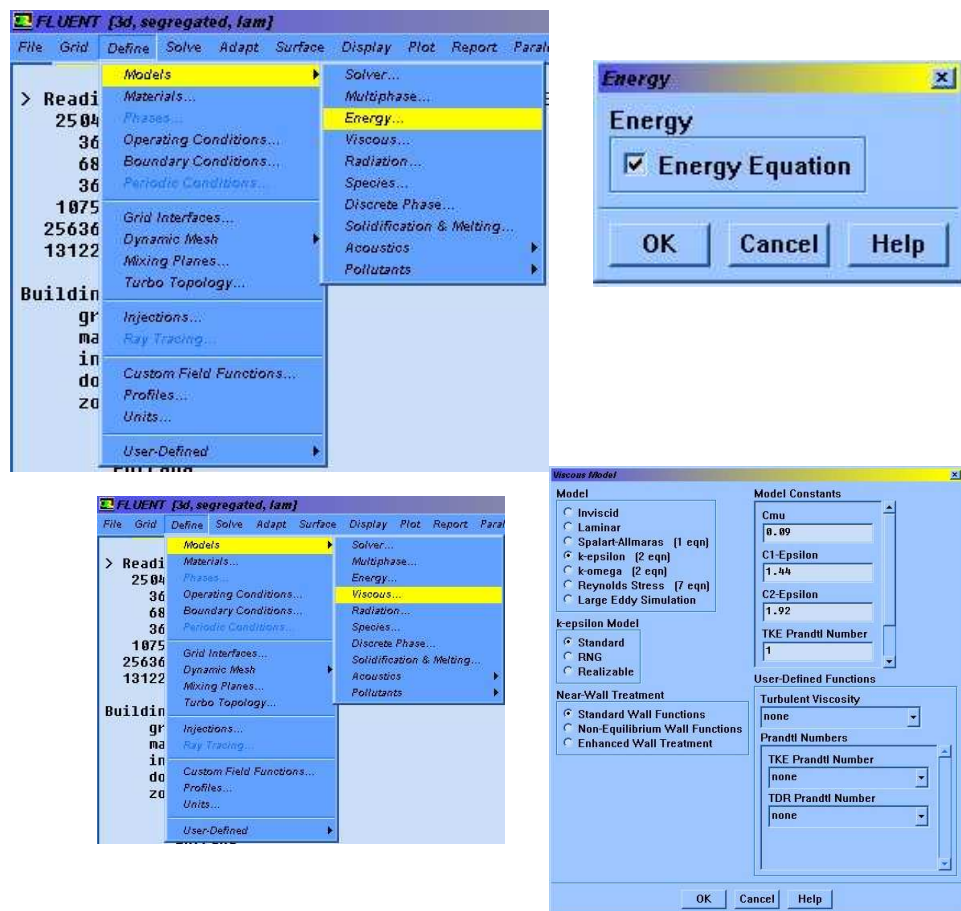




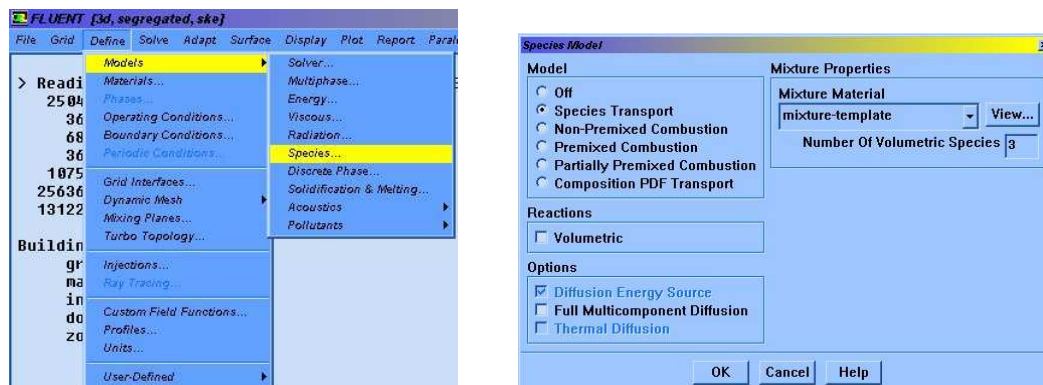
Seguidamente visualizaremos la malla en un entorno grafico que podemos manipular con el ratón, acto seguido le dejaremos al simulador que haga un chequeo automático de la malla, esto es; de nodos, vértices y aristas.



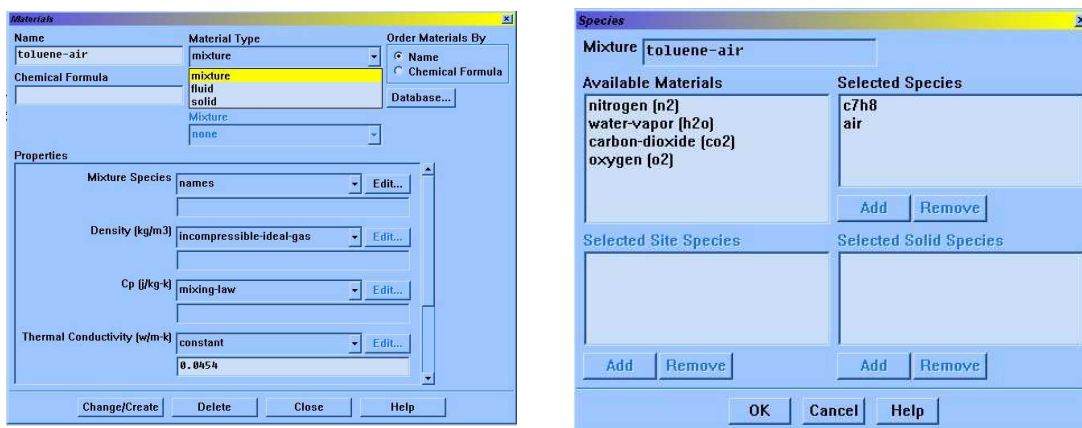
Llegados a este punto, pasamos a configurar todos los detalles de la simulación tal y como se describe en las siguientes imágenes. Configuraremos el tipo de flujo (laminar o turbulento), el fluido y las condiciones de operación tales como temperatura, presión y concentración, etc.



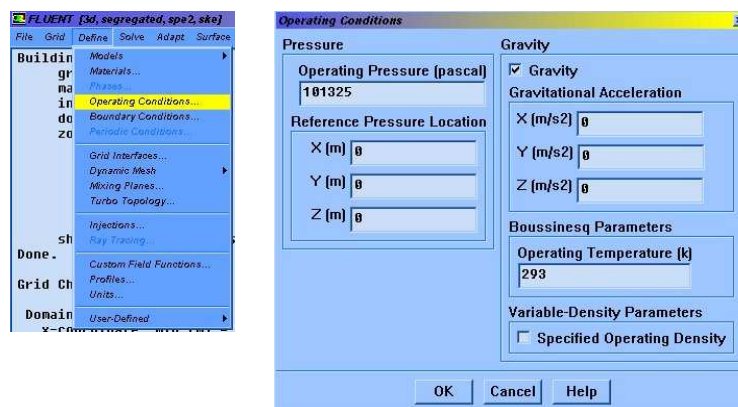
En las anteriores imágenes hemos podido observar como se procede para activar la ecuación de energía, para casos donde existen gradientes de temperatura. Seguidamente hemos visto como configurar el perfil viscoso de la simulación, y a continuación veremos como se define el tipo de fluido o compuesto que interviene en la simulación.



Accediendo a la base de datos podemos configurar no solo el tipo de fluido, sino también el tipo de mezcla. La base de datos es dinámica por lo que permite agregar o suprimir compuestos químicos que mas adelante usaremos en la composición final de la mezcla.

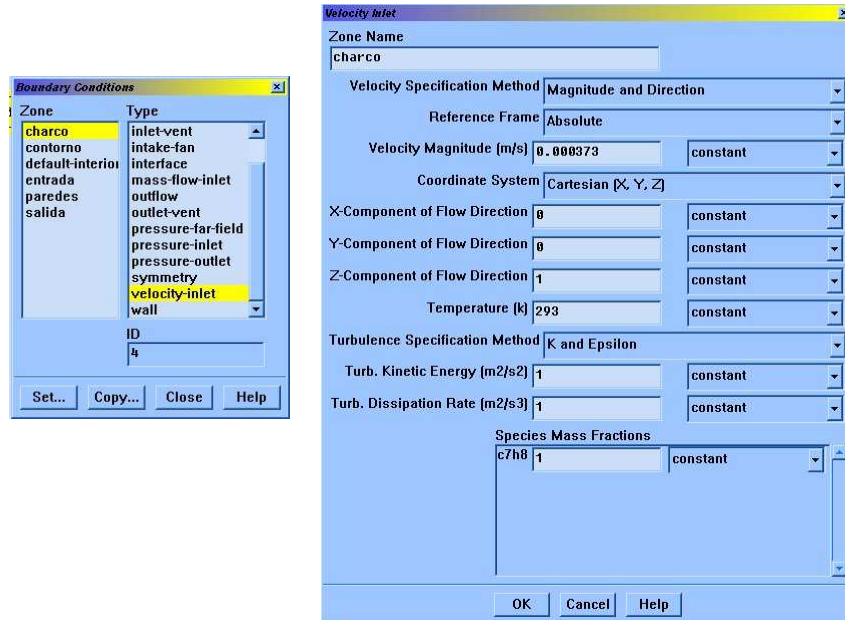


Después de caracterizar la mezcla o el compuesto, definiremos las condiciones de operación, temperatura, presión y gravedad.



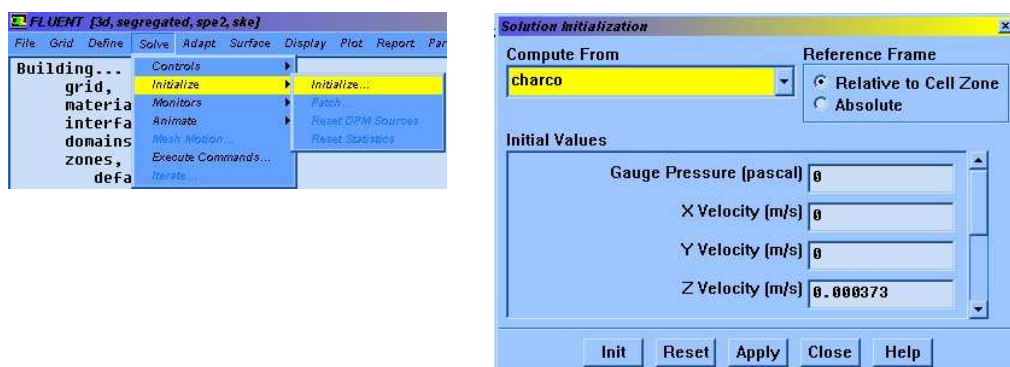


Dentro de los parámetros de simulación queda definir las condiciones de contorno, en la geometría de la malla.

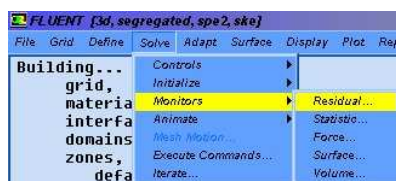


Para definir las condiciones de contorno tenemos varias opciones, o bien como pared o bien como entrada de velocidad ó como entrada de masa. Si por ejemplo seleccionamos entrada de velocidad, debemos tener en cuenta la velocidad a la que entra el flujo, su dirección, temperatura y la concentración como principales valores. Estos parámetros son cruciales para el buen desarrollo de la simulación, dado que si uno de ellos es erróneo el resultado puede ser no convergente.

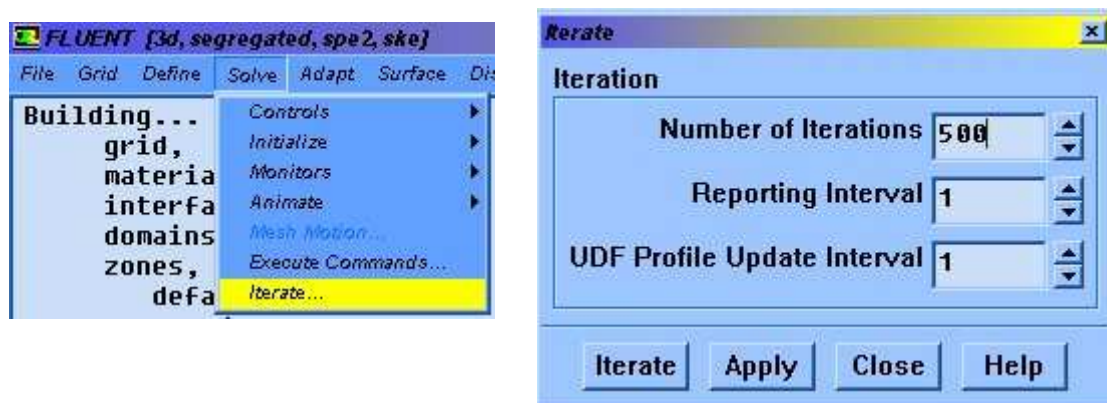
Una vez introducida toda la información, procedemos a inicializar la simulación.



Se debe constatar el punto a partir del cual arrancan los cálculos, en nuestro caso el charco o derrame. Esto significa que los primeros elementos finitos en ser calculados serán adyacentes a esta superficie definida. Esta es la ultima pantalla donde podremos rectificar variables de contorno.



Una vez definido el monitor de los residuales, podremos seguir durante la simulación el progreso de las variables que estamos calculando y los propios residuos.

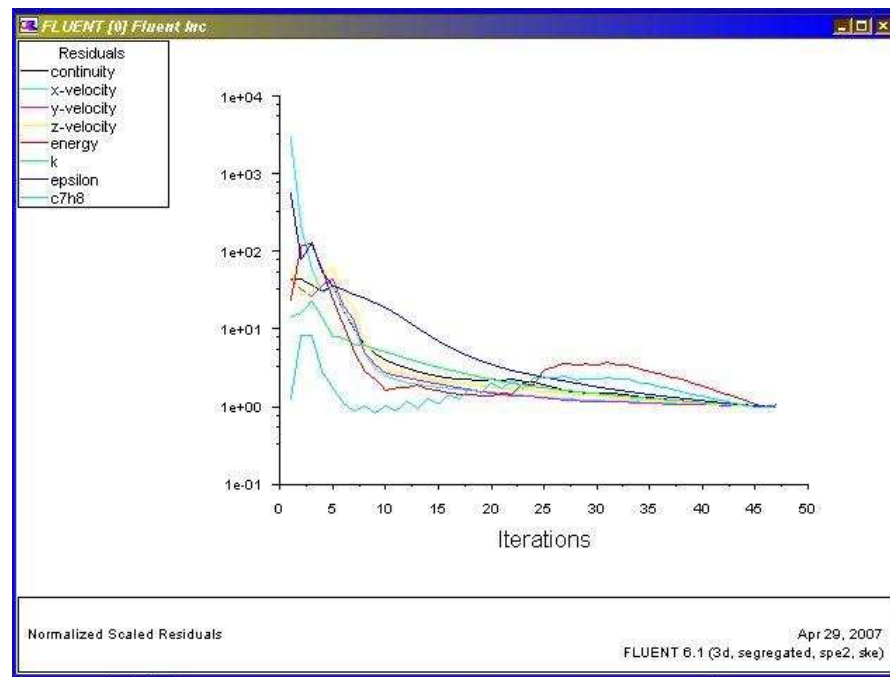


Se definen el número máximo de iteraciones a las cuales llegará este primer cálculo, seguidamente vemos como el simulador ofrece por pantalla iteración a iteración un report del avance del cálculo.

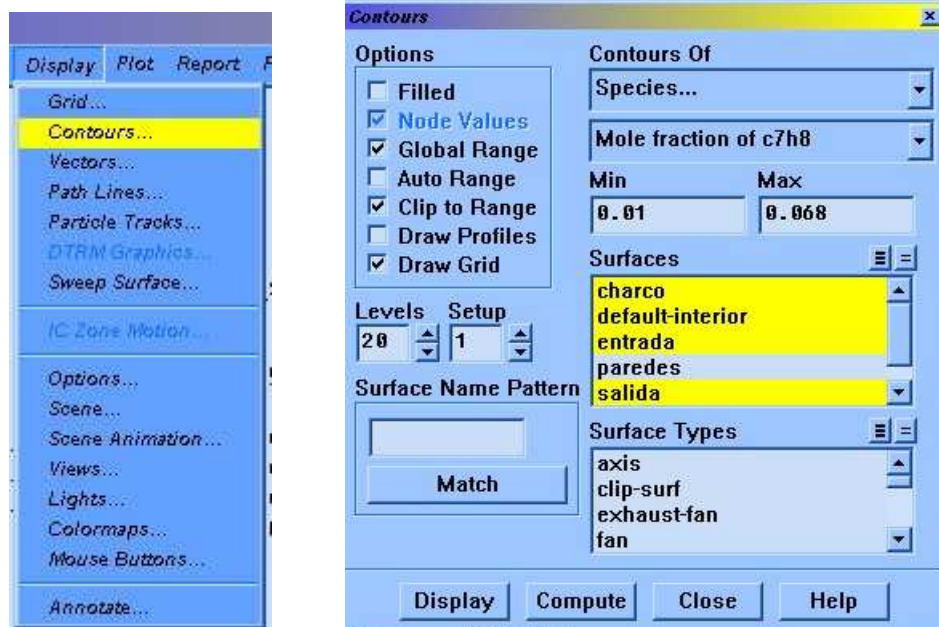
iter	continuity	x-velocity	y-velocity	z-velocity	energy	k	epsilon	c7h8	time/iter
1	1.0000e+00	3.3672e+00	9.5355e-02	7.7266e-02	5.4071e-06	1.9524e-02	2.1788e-01	7.5817e-04	2:46:20 499
2	1.0000e+00	5.7632e-01	7.0261e-02	3.9506e-02	1.7063e-05	1.9699e-02	6.0944e-02	2.3017e-03	2:36:02 498
3	7.3147e-01	2.2657e-01	4.9551e-02	3.0052e-02	1.8265e-05	1.8369e-02	8.0939e-02	2.1857e-03	2:27:46 497

Monitorizamos la simulación a través de estos parámetros, o de una forma más directa y grafica a través de una representación de los mismos. Concluiremos la simulación cuando ó bien alcancen un criterio de convergencia previamente definido, ó converja asintóticamente a un valor residual.

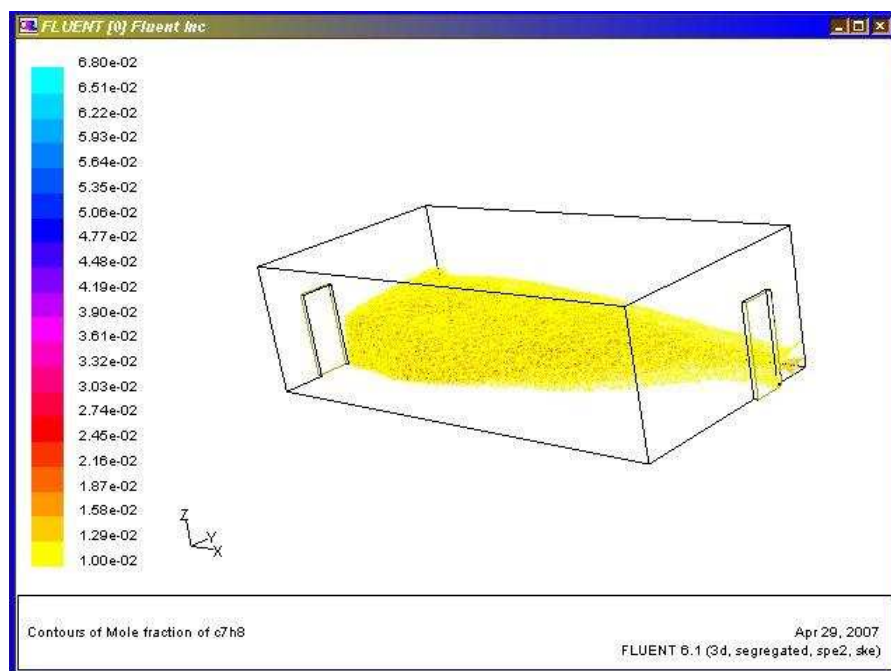




El último punto será la representación por pantalla del resultado como se muestra en las siguientes imágenes.



Obsérvese como se introducen los límites superior e inferior de inflamabilidad en el rango de representación, para definir así la atmósfera inflamable.



Aunque parezca trivial es preciso guardar los resultados, como "case & data", para poderlos recuperar posteriormente y realizar un nuevo cálculo acurado.



## ANEXO D. CÁLCULO DE TASAS DE ESCAPE (CETIB)

### D.1 Comparativa de los cálculos de tasas de emisión

Dado que las simulaciones ofrecen un resultado satisfactorio conviene, en buena medida, comparar dichos resultados con la realidad que se aplica a fecha de hoy. Como referente para ello tomaremos los cálculos de tasas de emisión realizados por el Colegio de Ingenieros Técnicos Industriales de Barcelona (CETIB). Esta comparativa nos ubicara en un contexto muy aproximado a la realidad por lo que podremos saber si nuestras simulaciones son viables a efectos pragmáticos o si distan mucho de estos valores de referencia. La metodología que emplearemos en el proceso comparativo será el siguiente: en primer lugar compararemos las tasas de emisión calculadas por nuestras formulas referenciadas y las tasas propuestas por el CETIB, donde sea posible por disponer de ello, compararemos los alcances inflamables. En segundo lugar atenderemos al tipo de operación que se realiza, bien sea una carga de depósito, un derrame o una fuga puntual.

#### D.1.1 Operaciones de carga y descarga de depósitos

Encontramos que para las operaciones de carga y descarga de cisternas (caso similar a bidón pero con otros valores) en el manual emitido por el CETIB (tabla 4.20) nos ilustra que la tasa de emisión es de 0.0005 kg/s. Si este calculo lo realizamos nosotros de la misma forma que hemos hecho los correspondientes al Bidón y al GRG obtenemos que nuestra tasa de emisión para un volumen de 20000 litros en un tiempo de operación de 45 minutos es de 0.000818 kg/s. Este resultado no es coincidente en numero pero si en orden. Además, el hecho de que nuestro calculo estime una tasa mayor y por tanto en su simulación corresponda a una mayor área inflamable, nos ofrece un rango de seguridad, es decir, un sobredimensionado de seguridad en la simulación.

Podemos concluir que según el CETIB nuestros valores calculados para las operaciones de carga y descarga en cuanto a lo que a tasas de emisión se refiere son correctos. Por tanto esta metodología de simulación queda avala por este manual a efectos de cálculo.

#### D.1.2 Emanación de vapores de un derrame o charco

Para este apartado, derrames de compuestos inflamables, sin especificar cual, factor que si se tiene en cuenta en la simulación vemos que propone el CETIB:



Evaporación de un charco

$$G = 2 \cdot 10^{-3} \cdot \frac{A \cdot \rho_v \cdot M}{R^{0.2}} \quad (\text{Ec. D.1.2-1})$$

$G$  = Caudal másico  $\text{kg} \cdot \text{s}^{-1}$

$A$  = Area charco  $\text{m}^2$

$\rho_v$  =  $P_{\text{vap}}$  liquido, proporcion respecto a  $P_{\text{atm}}$

$M$  = masa molecular  $\text{g} \cdot \text{mol}^{-1}$

$$G = 2 \cdot 10^{-3} \cdot \left( \frac{3 \cdot 1 \cdot 92.14 \cdot \frac{2900}{101325}}{8314^{0.2}} \right) = 2.60206 \cdot 10^{-3} \text{ kg} \cdot \text{s}^{-1} \quad (\text{Ec. D.1.2-2})$$

Por nuestro lado. Nuestras simulaciones se han basado en la formula propuesta por Kawamura y Mackay en 1985 [6] en la que obtenemos el resultado siguiente:

$$E = 3 \cdot 1.331 \cdot 10^{-2} \cdot \left( \frac{92.1 \cdot 2900}{8314 \cdot 293} \right) = 4.379 \cdot 10^{-3} \text{ kg} \cdot \text{s}^{-1} \quad (\text{Ec. D.1.2-3})$$

Así pues podemos comparar los resultados ofrecidos por las ecuaciones Ec. D.1.2-2 y Ec. D.1.2-3. De nuevo observamos como estos resultados no son coincidentes en número pero si en orden, por lo que al igual que en la comparativa de la carga y descarga podemos concluir que nuestra simulación toma tasa de emisión reales. Cabe destacar que de nuevo Kawamura y Mackay sobredimensionan el valor, lo que favorece nuestra simulación en un rango de seguridad respecto a los valores propuestos por el CETIB

### D.1.3 Emisión puntual de gas a presión

En este tipo de casos nos encontramos que el CETIB nos ofrece dos formas posibles de comparar nuestra simulación. La primera, como hasta ahora será comparando las tasas de emisión puntual en el escape, la segunda comparativa la podremos hacer por áreas o alcances inflamables.



En cuanto al cálculo de la tasa de emisión el CETIB propone seguir la siguiente formula:

$$G = 3.95 \cdot a \cdot \left[ M \frac{(P - 10^5)}{T} \right]^{0.5} \quad (\text{Ec. D.1.2-4})$$

$G$  = Caudal Másico ( $\text{kg} \cdot \text{s}^{-1}$ )

$a$  = area transversal ( $\text{m}^2$ )

$M$  = masa molecular ( $\text{g} \cdot \text{mol}^{-1}$ )

$P$  = Presión origen fuga (Pa)

$T$  = temperatura (K)

Para la emisión 2 mm encontramos el siguiente resultado:

$$G = 3.95 \cdot \pi \cdot (0.001)^2 \cdot \left[ 16 \cdot \frac{(183000 - 100000)}{293} \right]^{0.5} = 8.35 \cdot 10^{-4} \text{kg} \cdot \text{s}^{-1} \quad (\text{Ec. D.1.2-5})$$

Y para la emisión 5 mm de la misma forma podemos calcular:

$$G = 3.95 \cdot \pi \cdot (0.0025)^2 \cdot \left[ 16 \cdot \frac{(183000 - 100000)}{293} \right]^{0.5} = 0.005221 \text{kg} \cdot \text{s}^{-1} \quad (\text{Ec. D.1.2-6})$$

Mientras que en nuestros cálculos, ya referenciados en los apartados 7.6.3 y 7.7.3, tenemos que para la emisión 2mm y 5mm respectivamente los siguientes resultados:

resultado condicion choquet

$$Q \equiv G; Q = 9.7623 \cdot 10^{-4} \text{kg} \cdot \text{s}^{-1} \quad (\text{Ec. D.1.2-7})$$

resultado condicion choquet

$$Q \equiv G; Q = 0.00610 \text{kg} \cdot \text{s}^{-1} \quad (\text{Ec. D.1.2-8})$$

Por lo que de nuevo concluimos en lo siguiente: los resultados utilizados en la simulación y los propuestos por el CETIB para el cálculo de tasas de emisión no son coincidentes pero si del mismo orden. En cuanto al resultado numérico los empleados en la simulación son ligeramente superiores por lo que guardan un margen de seguridad adicional. Podemos pues determinar que la simulación tiene la tasa de emisión bien calculada y por tanto su resultado se aproxima mucho a la realidad. Para acabar de confirmar esta última afirmación aun podemos realizar una segunda comparativa para la emisión de una fuga puntual, como





avanzábamos al principio de este apartado y se trata de comparar la región de alcance inflamable.

CETIB propone en la tabla 4.13 (ver tabla D.1.3-1) de su manual el alcance de la zona debido a un escape de gas. Si tomamos como presión de entrada en la tabla los 170000 Pa, muy cercanos a los 183000 de nuestra simulación obtenemos que para diversos tipos de juntas por donde se produce el escape, el área inflamable alcanza desde los 0.5 al 1 metro de distancia de dardo, solo la junta TIPO 1 alcanza los 3,5 metros. Esta comparativa nos resulta útil si atendemos a que no tiene en cuenta el fluido vehiculado (de ahí que no esta tabulada la presión a la cual la fuga es sónica), pero si cuyos resultados engloban los nuestros por exceso y por defecto. En otras palabras, diríamos que los resultados empíricos también son del orden de los ofrecidos por la simulación.

TABLA 4.13 Extensión de la zona debido a escape de gas

Input:  $1.7 \cdot 10^5 \text{ N} \cdot \text{m}^2$

Output: Extension zona en metros:

Junta	TIPO 1	TIPO 2	TIPO 3	TIPO 4
	3.5	1.0	0.5	0.5

Tabla D.1.3-1 Referencia bibliográfica CETIB





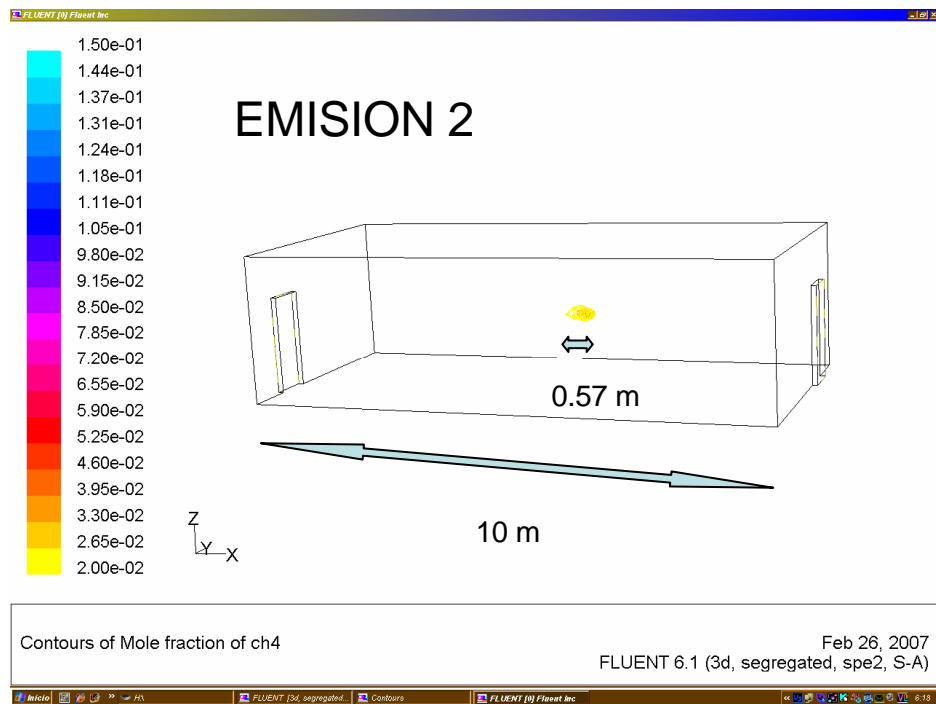


Fig. D.1.3-1. Alcance de la zona inflamable de emisión 2

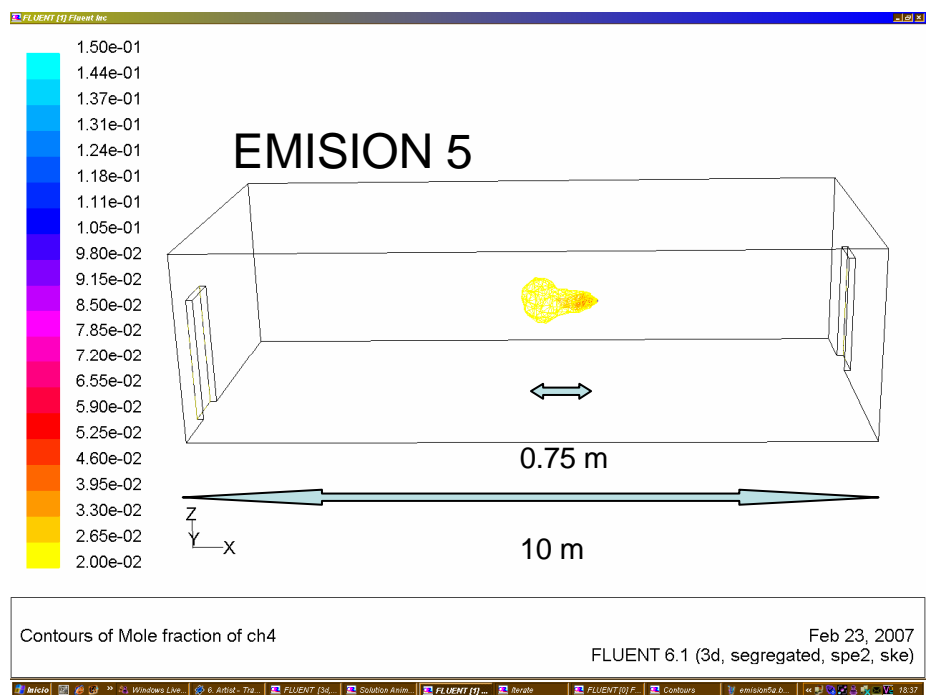


Fig. D.1.3-2. Alcance de la zona inflamable de emisión 5



## ANEXO E: FICHEROS DE CÁLCULO

Relación de carpetas y ficheros incluidos en el CD

### Memoria, documento Word

#### Carpeta archivos simulación

- Casos\_y\_mallas\_finales

##### 1. Bidón

⇒ Caso bidón

⇒ Malla bidón

##### 2. Grg

⇒ Caso Grg

⇒ Malla Grg

##### 3. Bidón Campana

⇒ Caso Bidón Campana

⇒ Malla Bidón Campana

##### 4. Grg Campana

⇒ Caso Grg Campana

⇒ Malla Grg Campana

##### 5. Charco

⇒ Caso Charco

⇒ Malla Charco.

##### 6. Charco Campana

⇒ Caso Charco Campana



⇒ Malla Charco Campana

#### 7. Emision2

⇒ Caso emision2

⇒ Malla emision2

#### 8. Emision5

⇒ Caso emision5

⇒ Malla emision5

#### Carpeta Archivos relacionados

- Calendari PFC
- Normatives i pautes PFC
- Registre PFC1
- Registre PFC2
- Manual ATEX

Las carpetas con nombre “caso” contienen los archivos de caso y datos de simulación de FLUENT. Las carpetas con nombre “malla” contienen los archivos de malla de GAMBIT.

